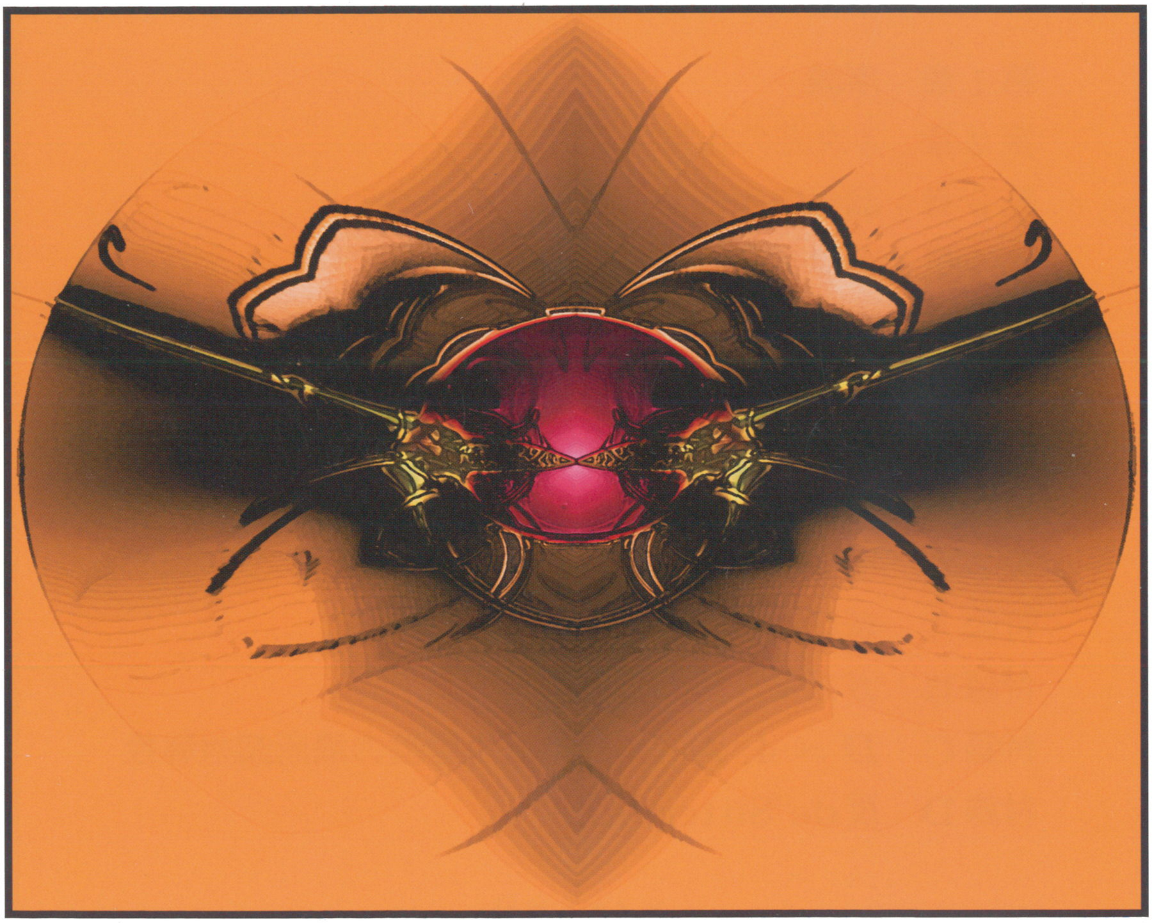
昭和38年7月2日第3種郵便物認可
2011年8月1日発行　第49巻8号　毎月1回1日発行
ISSN 0386―2240

数理科学

8
2011

特集　計算が拓く数学と物理の世界
自然を語る数値と計算



No.578

サイエンス社

MATHEMATICAL SCIENCES
Number 578 August 2011

計算が拓く数学と物理の世界

自然を語る数値と計算

表紙：戸川　隼人

お得な定期購読をおすすめします

毎号確実に御手元へ

地域によって書店店頭に陳列されない場合があります．**郵送料小社負担**にて確実に御手元へ届く定期予約購読をおすすめします．

予約購読は1年間（本誌のみ）11,000円，半年間（本誌のみ）5,500円．（税込み価格）

造本コストは更に上昇気味です．小社としてもあらゆる努力をもって廉価で提供してゆきたいと思っておりますが，定価改定の止むなき事態がかんがえられます．この場合予約購読期間中のものにつきましては料金据置きとなります．なお，臨時別冊のご注文については，本誌予約購読者の方には，商品到着後のお支払いにて承ります．

お申し込みは本誌とじ込みの振替用紙を御利用下さい．

数理科学特集一覧

63年/7～2008年/5 省略
2008年/6 線形代数の力
/7 物理的思考法のすすめ
/8 数の魅力
/9 トポロジカルな弦の世界
/10 ポアンカレ
別冊 対称性と保存則
/11 物理と論理
/12 確率論的物理観
2009年/1 グラフィックでわかる物理
/2 発展する量子力学
/3 方程式に潜む対称性
/4 現代数学はいかに使われているか［幾何編］
別冊 代数学の魅力
/5 微積分を楽しむ
/6 現象と物理概念を結ぶ方程式
/7 現代物理の世界像
/8 複素数
/9 シュレーディンガー
/10 数学と物理に広がる不変量
別冊 量子重力理論
/11 可積分系の世界
/12《原理》の探求
2010年/1 無限次元の魅力
/2 数学の可視化
/3 物理数学の効用
/4 現代数学はいかに使われているか［確率編］
別冊 現代幾何学の発展
/5 物理学事始め
/6 現代幾何と方程式
/7 物理学と行列
/8 力の統一にむけて
/9 南部陽一郎
/10 曲面の不思議
/11 連続から離散へ
/12 物理における《破れ》と調和
2011年/1 数論の探求
/2 物理現象を読み解く数学的手法
/3 方程式と現代代数学
/4 物理学と多様体
/5 初学者を悩ます数理の概念
/6 物理イメージと数式表現
/7〈隠れた〉物理法則

数理科学臨時別冊一覧

10年/6 非線形現象と微分方程式
10年/7 数物系のための圏論
10年/9 超弦理論を学ぶための場の量子論
10年/10 重点解説 ジョルダン標準形
10年/11 重点解説 ベクトル・テンソル
10年/12 行列解析の基礎
11年/1 超弦理論の基礎
11年/3 繰りこみ群の物理と数理
11年/4 超重力理論
11年/6 共形場理論

「数理科学」のバックナンバーは下記の書店・生協の自然科学書売場で特別販売しております

紀伊國屋書店本店（新宿）
紀伊國屋書店新宿南店
あおい書店中野本店
オリオン書房ノルテ店（立川）
くまざわ書店本店（八王子）
くまざわ書店桜ヶ丘店（多摩）
書泉グランデ（神田）
書泉ブックタワー（秋葉原）
三省堂本店（神田）
リブロ池袋店
ジュンク堂書店（池袋）
ジュンク堂書店（新宿）
芳林堂（高田馬場）
MARUZEN & ジュンク堂渋谷店
八重洲ブックセンター（東京駅前）
丸善丸の内本店（東京駅前）
丸善日本橋店
ブックファースト青葉台店（横浜）
有隣堂イセザキ町本店（横浜）
有隣堂西口・東口（横浜）
有隣堂厚木店（厚木）
ジュンク堂書店（盛岡）
ジュンク堂書店（新潟）
戸田書店静岡本店
ジュンク堂大阪本店
紀伊國屋書店梅田店（大阪）
旭屋本店（大阪）
アバンティブックセンター（京都）
ジュンク堂書店（京都）
ジュンク堂京都BAL店
ジュンク堂書店（神戸）
ジュンク堂三宮駅前店（神戸）
ジュンク堂書店（大分）
喜久屋書店倉敷店
MARUZEN & ジュンク堂広島店
紀伊國屋書店福岡本店
ジュンク堂福岡店
ジュンク堂鹿児島店
紀伊國屋書店新潟店
金港堂（仙台）
金港堂パーク店（仙台）
ジュンク堂書店（仙台）
ジュンク堂書店（秋田）
鹿島ブックセンター（いわき）
友朋堂（つくば）

――大学生協・売店――
東京大学 本郷・駒場
東京工業大学 大岡山・長津田
東京理科大学 新宿
早稲田大学 理工学部
慶応義塾大学 矢上台
福井大学
筑波大学 大学会館書籍部 第一学群書籍部
埼玉大学
名古屋工業大学・愛知教育大学
大阪大学・神戸大学 ランス
京都大学・九州工業大学
東北大学 理薬・工学
室蘭工業大学
徳島大学 常三島
愛媛大学 城北
山形大学 小白川
島根大学
学習院大学 成文堂
北海道大学 クラーク店
熊本大学
名古屋大学
広島大学（北1店）
九州大学（理系）

August 2011 MATHEMATICAL SCIENCES Number 578

特集／計算が拓く数学と物理の世界

巻頭言

大石 進一

数値計算について，最近になって幾つもの非常に大きな発展があり，思いもかけない理工学における展開がなされている．本特集号はその展開を数学と物理を中心として俯瞰するものである．

大きな展開の一つは，誰もが超大規模計算を行えるような計算環境を得たということである．少し前までは，大規模科学計算はスーパーコンピュータの扱うものとほぼ限定されていた．しかし，パソコンの普及によって，単体でも高性能な計算ユニット（CPU）が開発され，それが誰でも持つパソコンに組み込まれるようになった．スーパーコンピュータも超並列化はされるものの，パソコンに用いられるような CPU を多数個集めることによって実現されるようになった．したがって，計算時間の違い等を別にすれば，スーパーコンピュータの計算とパソコンの計算は質的にはそんなに違わないものになったといえる．円周率の計算の世界記録が，パソコンを使って出される時代になったことはその例証である．パソコンを進化させようという日常的な競争がついには誰もがとてつもない計算をできるような時代にしたのである．本特集の記事「数値計算の今昔」は現代的な数値計算の分野において，世界レベルの研究成果を次々に与えてきた著者の，計算機が導入された直後から現代に至る，個人史が記されたものである．個人史を越えて，数値計算の研究が如何にダイナミックなものであるか，息を呑む．「固有値問題における数値計算の発想」では，数値アルゴリズムの中で最も難しいものである固有値計算のアルゴリズムを創造する発想が如何に桁外れであるかが語られている．

このような進展により，物理においては，基本法則を表す微分方程式を初期値を与えて数値計算する法則主導型の方法が成立するようになった．これによって，世界の誕生の瞬間から現在まで，そして遠い将来までをシミュレーションする壮大な計算が行われている．ダークエネルギーなどの研究の成果を見ると幻想的な感覚まで揺さぶられる．実際，様々に違う宇宙の誕生からその宇宙の発展を計算し現宇宙がその中で非常に特異なバランスの上に成立しているというようなことが計算で証言されると何とも言えない感動に身震いする．まさに計算が開く物理の世界に驚きを隠せないのである．本特集における，「シュレーディンガー方程式から物性へ」は原子分子の世界の基本法則であるシュレーディンガー方程式から物性を計算するアプローチで，電子顕微鏡を越える究極の倍率をもつ顕微鏡で物質を見ているような感覚を覚える．一方で，「数値計算と相対性理論」では，相対性理論をベースに宇宙を数値計算によって再構成するというような研究分野が紹介されている．

数値計算における信じられないような進歩は，また，数値計算の厳密な数学化の形でなされた．数値計算は，数学的には実数を，有限桁の小数で近似

し，場合によっては宇宙の電子の数に匹敵するような回数の四則演算を行う．その毎回の四則演算においては，四捨五入に相当するような数の丸めが行われている．また，微分方程式で記述される基本法則を離散化された方程式で近似する．そのような，様々な誤差があるので，数値計算によって計算された「数値解」は基本法則を表す微分方程式の「真の解」になっている保証は全くないのである．従来は，そのような誤差の解析は，とてつもなく困難で手をつけてはいけないタブーの領域に属すると考えられてきた．したがって，数学においては，数値計算は単に勘を磨く手段のようなものと考える向きもあった．数値計算アルゴリズムの設計が壮大な数学であるのに対して，数値計算結果が含む誤差の研究は巨大な壁に阻まれて，前数学の状態であったといえる．そのようなときに，1950 年代から研究が始まってはいたが，停滞していた「精度保証付き数値計算」の研究に大きなブレークスルーが多層的に起きて，数値計算の誤差が「実用的に」計算可能となったのである[1]．それは，物理の最先端に現れるような「超大規模な計算」にはまだ適用できないが，「大規模計算」程度には適用できるようになった．すなわち，「実用的な規模の」数値計算の誤差も数学的に厳密に解明できるようになったのである．それは非常に大きな数学的な衝撃であると言っても過言でない．

「力学系の大域的構造に対する計算機援用解析」では，そのような精度保証付きの数値計算によってカオス系のモデルに現れる大域構造を数学的に厳密に証明するアプローチを紹介したものである．そこに現れる壮大な計算が，数学的思考のすさまじさを感じさせる．「流体力学における精度保証付き数値計算」は流体を記述する方程式の解の存在を数値計算を利用して行う最先端の研究分野が紹介されている．本稿の著者はまさにこのような分野を切り開いてきた．精度保証の基礎となる区間解析は日本のオリジナルともいえる．現代においても本分野の最先端が日本の研究者によって切り開かれているのは大変喜ばしいことである．

応用数学の一分野に「計算幾何学」がある．地図情報処理や VLSI 設計など，現実世界の問題（工学）では初等幾何学の問題で計算量が膨大なものが現れる．その解法アルゴリズムを構築するのが計算幾何学である．計算幾何学においては，実数演算が計算機によって実行可能であるとして解を計算するアルゴリズムが設計される．このレベルとしては正しい解が計算できることは数学的に証明される．しかし，有限桁計算しかできない現実の計算機では，丸めの誤差の存在のために，そのアルゴリズムによって正しい解が計算される保証はない．現代コンピュータは実数を 64 ビットの有限桁数として近似する．したがって，与えられた問題に対して正しい解を計算するために精度が不足することがある．その不足分をアルゴリズムの高速性を損なわないように補うことは重要な問題であった．それが，エラーフリー変換という新しい技法の導入によって可能になったというのも最近の数値計算の大きな進展である．「数値計算と計算幾何」ではそのような進展がつぶさに語られている．「エラーフリー変換がもたらす数値計算の新たな方向性」では，このような展開は数値計算の方式を根本から進化させるような基本技法になることを予想している．浮動小数点計算の加減乗算の誤差は浮動小数点数になり，浮動小数点計算によって計算できるというのがエラーフリー変換の出発点である．すなわち，加減乗算に限って言えば，その誤差まで計算することによって，計算による情報のロスがなくなるのである．従来の数値計算が，丸めによって，誤差を捨てていく非可逆過程であったものが，エラーフリー変換は誤差まで計算することによって，数値計算を可逆過程に変えるというコペルニクス的転換を与える．そこからどのような数値計算の世界が展開されるか楽しみである．

参考文献

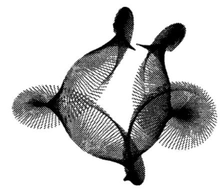
1) M.T. Nakao, S. Oishi ed., Special Issue on State of the Art in Self-Validating Numerical Computations, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, **26**:2-3 (2009) pp.1–530.

（おおいし・しんいち，早稲田大学理工学術院）

特集／計算が拓く数学と物理の世界

数値計算の今昔

1老兵の回想



山本　哲朗

1. はじめに

大学を去って数年，つれづれなる日々を過している老兵に，思いがけなく，数値計算の歴史について記せとの御依頼である．正面切って歴史を語るとなると，資料も必要で準備を要し，また，実際に見ていない事柄も見たかの如く記さねばならないから，これはかなりの難事である．

幸い，私は昭和30年代の一時期，企業の計算センターで技術計算を担当し，IBM機を用いて，数値計算業務に従事したことがある．当時を回想しても，読者の御参考にならないかも知れないが，一方でまた温故知新の言葉もあるから，昭和30年代～60年代を中心にして，私と数値計算との縁（えにし）を，思い出すままに綴ることも，語り部として，意味をもつかも知れないと思い直し，この小文を綴ることにした．

2. 大学時代の数値計算教育

私は昭和34年（1959年）に，広島大学理学部数学科を卒業した．4年間に私の受けた数値計算の教育は，3年次の，占部実教授による，「応用数学及び同演習」の3単位である．占部教授は非線形振動論が御専門で，共立現代数学講座に，非線形問題（自励系振動論）の著作を出版されたばかりの，国際的にも著名な研究者であった．後に聞くところによると，我が国初の東海道新幹線は，先生のおかげで，パンタグラフのスパーク問題が解決し，無事開業に漕ぎつけたそうである．

講義内容は，数値計算の手ほどきとも言うべきもので，数値計算の誤差，Gauss, Bessel, Stirling等の補間公式，数値微分，数値積分，さらに，非線形方程式の数値解法と常微分方程式の初期値問題の解法であった．特に非線形方程式の解法では，ニュートン法に対する簡単な説明と，縮小写像の原理を用いるCollatzの収束定理を述べられ，最後の時間に，「反復列は有限回の反復の後，振動状態に達する」という先生御自身の結果（*J. Sci. Hiroshima Univ. Ser. A* **19** (1956)）を述べられた．しかし，連立1次方程式や行列の固有値問題の解法については，一切触れられなかった．

後年，図書室で，昔占部先生が借り出されていた書物を見つけ，開いてみたところ，ある特殊な行列の概念に鉛筆で書き込みがしてあったから，全く御関心がなかったわけではないと思う．生憎，当時の計算機では，メモリーを多く必要とする行列演算は不可能で，講義を控えられたのであろう．なお，演習のレポートは，タイガーの手回し式計算機を用いて作成した．昭和30年代初期はそのような時代であった．

余談であるが，私は，4年次のゼミは，代数を専攻し，佐藤始先生（当時講師）の御指導の下で，出版間もないO. Zariski–P. Samuelの *Commutative Algebra* (Van Nostrand, 1958) を読んだ．

ゼミは毎週1回，夜6時から9時過ぎまでであっ

たが，ゼミが終って数学教室の廊下を歩くと，いつも，占部先生の研究室だけ電気があかあかとついていて，中で，カシオのリレー計算機が，ガチャガチャと機械音を響かせていた．先生はそのとき何を計算されていたのであろうか．

3. 昭和30年代のコンピュータ

昭和36年，修士課程を修了して，企業の計算センターに勤め，IBM 650型真空管式電子計算機による数値計算に従事した．使用言語はFORTRANであったが，記憶容量が2千語と少ないため，コンパイルは1回で済まず2回必要であった．またプログラム格納領域とデータ格納領域の割り付けも必要であった．計算速度はm secの単位であるから，計算中に，ランプの点滅具合を眺めていると，今プログラムのどのループを実行しているかがわかる．旧き良き時代であった．今思い出すと，郷愁を覚える．

この機械は，翌年，トランジスタ式の1401小型機と7074中型機に切り換えられた．計算速度がμ secになったため，もはや，ランプの点滅を識別できず，実行状況を目で確認することはできなくなった．写真1～3は，私のアルバムから取り出したもので，友人の撮影による．

1401システムは7074の補助機で，本体と高速カードリーダー及び1行132桁を一度に印字する高速ラインプリンターとからなる．可変語長で，事前に計算桁数を任意に指定でき，コンパイルさ



写真1　1401システム（1963年頃撮影）．

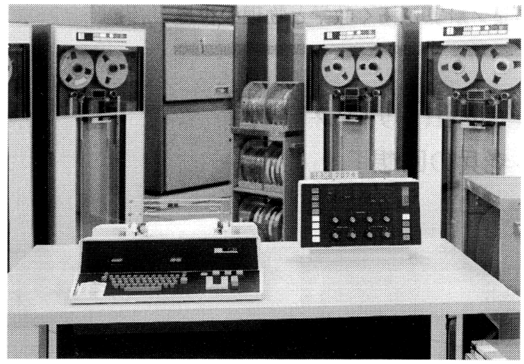


写真2　7074のコンソール部（1963年頃撮影）．

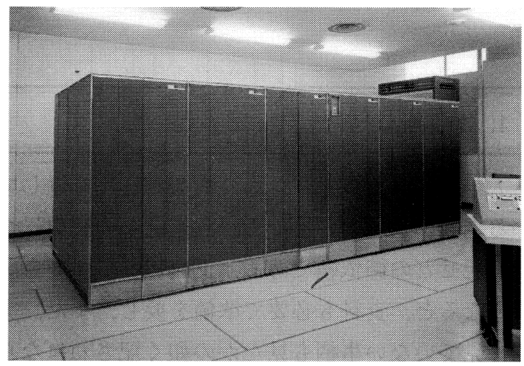


写真3　7074の中枢部（記憶装置）（1963年頃撮影）．

れた機械語をダンプできるので，とても使い易い機械であった（なお，7074も，コンパイルするとFORTRAN文の横に機械語が印刷されるので，これも便利な機種であった）．

あるとき，1401で複雑な計算式をコンパイルしたところ，様子がおかしい．コンパイルされた機械語と照合してみると，正しくコンパイルされていないことが判明した．止むなく，計算式を短く分けて書き直したことがある．当時，IBM機の性能は，ハードもソフトも，国産機より圧倒的な優位にあった（国産機の名誉のためにそれを具体的に記すのは差し控える）が，そのIBM機にしても，このようなことがあったのである．

写真2と3は7074のコンソール部と中枢部（記憶装置）であるが，これだけ重量級の装置でも，記憶容量は1万語ほどで，80×80程度の行列演算も，直接には難しく，複数の磁気テープ装置を補助として使用した．

すでに述べたように，私は連立1次方程式や行

列の固有値問題に対する数値解法については何も知らず，たまたま，社内の図書室にあった書物[1)]等でこれらの方法を学んだ．

ここで脱線するが，ラインプリンターは，印刷する文字を1行にすべて揃えて印字するから，文字の組合せをかえると，印刷時の音が異なり，また印刷速度（タイミング）も1行毎に異なる．これを利用して，軍艦マーチの音楽を奏でる1401用ソフトが，計算センターに持ち込まれたことがある．プリンターは無意味な文字を印字し続けているが，耳を澄ますと，軍艦マーチの曲を奏でているのである．誰れの作品か知らないが，いつの時代でも，マニアックな人はいるものである．

4. 精度保証付き数値計算

当時，研究会に参加すると，時に，コンピュータ限界説が囁かれていた．しかし，その後LSIからVLSIへと回路の集積度はますます高くなり，発展のスピードは落ちたとはいえ，コンピュータは依然進化を続けている．今後ますます大型問題が解かれるようになると，出力結果の信頼性は，どのようにして保証されるのであろうか．

我が国では，昭和39年，日本大学永坂秀子先生による，3項方程式に対するGauss消去法の有名な誤差解析があり，アメリカでも近年，Gauss消去法では，行列が一般の場合でも，計算途中で丸め誤差の打ち消しが生じるために，J.H. Wilkinsonによる誤差解析の結果ほど誤差の累積はなく，行列の次数が大きいときにも，安定な解が得られることが知られつつある．

しかし，ウィスコンシン大学数学研究センター（MRC）L.B. Rall教授の言葉を借りれば，「事は人類の安全に関わる問題を含む」のである．精度保証付き数値計算の，今後の進展を期待すると共に，本特集号で，最前線の結果を学べるものと楽しみにしている．

なお，占部先生は早くから数値解の精度保証を意識され，ひそかに準備をすすめておられた．それを詳しく述べる余裕はないが，先生は，まさしく，我が国における応用数学の巨人であったと思う．残念なことに1975年に病没された．享年63．

5. 数値解析ことはじめ

昭和40年（1965年），恩師中井喜和教授のお誘いにより，母校理学部数学科の助手となり，行列演算に関する数値解析の勉強をはじめた．

広島大学理学部の前身は広島文理科大学である．原爆で建物は多少破損したが，図書は健在で，敗戦後，江田島の海軍兵学校蔵書も貰い受けたため，O. Perron（1907）の論文等，古い文献の閲覧にも不自由はなかった．

私は，週1回，線形代数演習（後期）と群論演習（翌年前期）を担当する以外にノルマはなく，当時出版されたばかりの書物[2)]を読む一方，同書巻末の参考文献に記載された論文を，孫引きを繰り返しながら読んだ．（実を言うと，この書物は誤りが非常に多くて，原論文を読まざるをえなかったのである．）そのとき作成したノートは，今や私の貴重な財産となっている．

6. 国内の数値解析研究会

当時，数値解析の研究集会は，毎年秋に，京都大学数理解析研究所で開かれており，私も1965年から参加した．講演の中心テーマは，関数近似や常微分方程式の初期値問題，数値積分等であって，行列関係のテーマは少なかった．

その頃外国では，行列の固有値問題に対するHouseholder–Givens（HG）法が注目されはじめていたが，国内の大学には，大型行列を扱えるコンピュータがなく，関心が薄かったのであろう．HG法とJacobi法とを比較する数値実験報告が，国内で発表されたのは，1970年になってからである．

その後，京都大学山口昌哉教授を代表者とし，その門下の藤井宏（現京都産業大教授），三村昌泰（現明治大教授）両氏を中心にC & A（Computation and Analysis）セミナーが組織された．こちらは偏微分方程式の数値解法に関する講演が多かった

が，若手が中心で，機関誌の発行，夏の合宿等活発な活動が展開された．

7. Lanczos 法の理論的可能性

昭和 41 年（1966 年）秋，教養部に講師として転出した．その後教養部は，全国的な大学紛争の波に巻き込まれ，研究室を封鎖されたりしたが，昭和 43 年に，行列を 3 重対角化する Lanczos（L）法の理論的可能性を追求し，スイス連邦工科大学（ETH）チューリッヒ校 H. Rutishauser 教授の結果を深化・精密化することができた．

中井先生は，これを学位論文とすべく，慎重を期して Rutishauser 教授に査読を依頼され，返事が届いてから，学内の手続きを開始された．私は，その報告書のコピーを中井先生からいただき，今も大切に持っている．

論文が出版されてからしばらくして，この論文は *Math. Review* 誌でオックスフォード大学の L. Fox 教授によりレビューされた．レビューの最後に「数値的には，ベクトルが近似的に直交する場合の処理が，問題としてまだ残っている」との注意が与えられている．実は，同じ注意は Rutishauser 教授のレビューにもあったのである．しかし，この問題は，行列の正則性を数値的に判定する問題と同様に，数学的には議論不可能な問題であるから，両先生の指摘は気にならなかった．

この論文は，書物[2)]における L 法の再直交化（2 つのベクトルのとり直し）に関する，あいまいな記述に疑問をもち，関係資料を読み漁った後に，長い間考え続けて得た結果である．地味な結果であるが，これにより L 法の可能性に対する数学的議論は完了したと自負している．

残念なことに，Rutishauser 教授は，その後，交通事故で急逝された．世の中には，時に信じられないことが起こる．

8. 愛媛大学へ

昭和 44 年（1969 年）秋，私は大学紛争の余燼がくすぶる教養部から，愛媛大学工学部に助教授として移動した．その半年後，情報工学科に，新進気鋭の野田松太郎氏（現愛媛大名誉教授）が，大阪市立大学から，自信満々，着任された．聞けば同氏は数値計算に詳しく，入出力に IBM カードを使うという．昭和 40 年に大学に移ってから，どの大学のコンピュータも，紙テープ仕様で，全く馴染めずにいたから，私はようやく仲間を得た気分になり意気投合した．

同氏から我々も大型計算機センターを使えると聞き，東大，京大，九大の各センターに出かけて使ってみた．この中で最も使い勝手が良かったのは東大である（理由は省略する）．

その後，同センターはトークンカードと称する現在の ATM カードに似たカードを導入し，電光掲示板に処理中のジョブ番号を表示するなど，先端的方式を採用した．以後，東大ばかり使ったので，他のセンターが，どう変わったかは知らない．

その後，私は微分方程式の固有値問題に関心を持ち，Rayleigh–Ritz（RR）法と Weinstein–Bazley（WB）法を勉強した．御承知の如く，前者は固有値の上界評価を与え，後者は下界評価を与えるから，RR，WB 両行列の次数 n を増すことにより固有値をはさみ打ちにして追い詰めるのである．但し連続スペクトルがあれば，それは除いて考える．

私は両方法を有限 Hill 方程式

$$u'' + \left(\lambda - 2\sum_{j=1}^{K} c_{2j}\cos 2jx\right) u = 0,$$
$$u(0) = u(\pi) = 0$$

に適用して次の結果を得た：n 次 RR 行列と WB 行列の固有値をそれぞれ $\Lambda_1^{(n)} < \cdots < \Lambda_n^{(n)}$, $\lambda_1^{(n)} < \cdots < \lambda_n^{(n)}$ とし，自然数 k $(1 \le k < n)$ を固定するとき，次が成り立つ．

$$\Lambda_i^{(n)} - \lambda_i^{(n)} = \begin{cases} o((C/N^2)^{2m}) & (i = k), \\ O(n^{-2[k/K]}) & (i = n - k), \\ o(1) & (i = n). \end{cases}$$

但し m は自然数で $n \to \infty$ のとき $N = 2(n - mk) \to \infty$（たとえば $m = [n/(2k)]$），C は n に

無関係な定数である．

固有関数の評価も導けたのでこれらの結果をまとめて *SIAM J.N.A.* (1975) 誌に投稿し，掲載された．簡単な方程式であり，演習問題に過ぎないとの御批判はあるかも知れないが，今も気に入っている結果である．

9. ニュートン法ことはじめ

愛媛大学に移って間もなく，Rall 教授の書物[3]を読み，はじめて Banach 空間におけるニュートン法と Kantorovich の定理の存在を知った．作用素の k 階導関数を，k 重有界線形作用素として捉える抽象微積分の理論は，私には新鮮であり，「数値計算には品質保証が必要」という Rall 教授の主張にも共鳴した．但し，この書物の，Fréchet 高階偏導関数の，偏微分の順序交換に関する証明は，不完全である．その証明を補うには，H. Cartan の書物[4]（仏語）が最適である．さすが大数学者だけあって，記述は明快・完璧で非の打ちどころがない．

本誌別稿に記したように，以来，私はニュートン法に魅せられ，そのうち，Wilkinson その他による線形演算に関する数値解法の多くは，形をかえたニュートン法にすぎないことに気付いた．

その後，ノイマン賞とチューリング賞受賞者 Wilkinson 先生の論文の種明しをした論文を書き，先生に直接送り付けるという失礼なことを何度かした．さすがに，そのままでは掲載許可とならず，他誌に投稿し直したり，文章を手直しして掲載許可に至ったりした．また，先生が国立物理学研究所（NPL）を御退職後，ライフワークとして執筆中の原稿の内容と偶然一致してしまったこともある．そのとき，先生は，「自分の原稿は未発表であるから，貴下の論文を reject することはできない」と accept して下さった．さすがであった．

10. ガトリンバーグ国際会議

Wilkinson 先生にとって，私はさぞ，無礼で，

嫌な奴であったに違いないが，それにも関わらず1981年オックスフォードで開かれた第8回ガトリンバーグ国際会議（委員長Fox先生，副委員長Wilkinson先生）に招待していただいた．

この会議は，1959年にHouseholderにより創始され，第4回（1969）までガトリンバーグで開かれたので，以後もこの名称が用いられている．これは数値線形代数を主要なテーマとし，参加者を招待者のみ100名に限定して開かれるクローズドな会議で，日本からは，田辺国士教授（当時統数研，後に早大）と共に参加した．

F.L. Bauer, G. Golub, W. Gragg, W. Kahan, V. Kublanovskaya, P. Lancaster, B. Parlett, H. Schneider, O. Taussky, R.S. Varga, D.M. Young 等々，かねて論文を通じてお名前を存じ上げている著名人が多く，私は，ここで，上記の方々以外にもたくさんの人たちと知り合った．O. Axelsson, P. Deuflhard, M. Fiedler, W. Hackbusch, I. Marek 等もそのような人たちの一部である．

私の国際交流の原点は，この会議に招待されたことにある．

11. MRCの思い出

紙数が残り少なくなってきたから，駆け足で，MRC滞在中の思い出の断片を記す．

Rall先生の書物に触発されて，Kantorovichの定理に関係する論文を読み進むうちに，1982年頃，今迄多くの人々により得られているニュートン法の誤差評価は，実はKantorovichの結果を越えていないことに気付いた．

一見異なるように見える複雑な評価式も，調べてみると，Kantorovichの評価式と同じであり，他にもこのような事実が芋づる式に続々と見つかるのである．その一部は，ベルギー・ルーヴァンでのJCAM国際会議（1984）で発表した．

その翌年の1985年3月から7カ月間，私は文部省長期在外研究員として，区間数学を勉強すべく，MRCに滞在した（期間を7カ月にしたのは，ゼミ生を抱えていたからである）が，当初の目的はどこかに吹っ飛んで，MRC到着後，毎日研究室にこもって，Kantorovichの評価とその他の評価との照合作業に夢中になった（Rall先生には誠に申し訳ないことであった）．

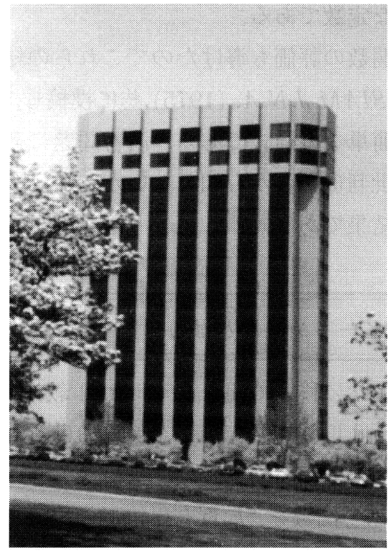


写真4　MRCの入っていた建物（1985年4月30日撮影）．

MRCの図書室は貧弱であったが，数学科の図書室に行けば必要な文献は大抵手に入る．またRall先生が，私の知らない文献のコピーを，どこからか探し出して下さったりして，助手時代と同じ研究三昧の至福の日々を送った．

最後に，Ostrowskiの評価がKantorovichの評価と同じであることを見出して，全作業が完了したのは，6月頃であった．これで，既存の誤差評価のすべてに，全順序で優劣をつけることができた（拙著[5]の付録Bを参照）．

折よく8月にワイオミング大学で開催の研究会でS. Smaleがニュートン法の特別講演をすると知り，飛び入りで講演を申し込んだ．

実は，1985年，アメリカ陸軍は，突如，MRCに対する支援打ち切りと，コーネル大学に新センターの設立を決定し，ウィスコンシン大学では大問題となっていた．私はその裏事情を，この研究会のパーティの席上で，陸軍関係者から聞いたが，それをここには記せない．かくして，MRCは，存

続へ向けた J.A. Nohel 所長の奔走も空しく，翌年，30 年の歴史に幕を降ろしたのである．日本と違って，アメリカの社会は巨大で非情である．

なお，MRC 滞在中に Ostrowski（1893–）が亡くなり，翌年，Kantorovich（1912–），Wilkinson（1919–）と巨星の訃報が相次いだことも，ここに記しておきたい．

12. おわりに

MRC からの帰途，スタンフォードの Golub 教授を訪問して，帰国した（Golub 教授も今は亡い）．その後，あちこちの国際会議に招かれたので，私も今までのお返しに，1990 年以降，国際会議と国際ワークショップを何度か（今思い出すだけで 6 回），松山で開催した．少しは国際貢献ができたかと思う．御支援・御協力下さった関係各位に，あらためて，深い謝意を表したい．

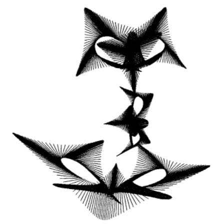
昔外国機に大きく差をつけられていた国産機も，今や外国機と肩を並べるようになった．国際交流も，近年，ようやく，同様な状況になってきたと感じる．現役諸兄の一層の御活躍を期待したい．これは老兵からのエールである．

引用文献

1) A. Ralston and H.S. Wilf, *Mathematical Methods for Digital Computers*, John Wiley, 1960.
2) A.S. Householder, *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*, Blaisdell Pub., 1965.
3) L.B. Rall, *Computational Solution of Nonlinear Operator Equations*, John Wiley, 1969.
4) H. Cartan, *Calcul Différentiel*, Hermann, 1967.
5) 山本哲朗,『2 点境界値問題の数理』, コロナ社, 2006.

（やまもと・てつろう，愛媛大学名誉教授）

力学系の大域的構造に対する計算機援用解析



國府　寛司

1. はじめに

近年，区間演算を用いた精度保証付き数値計算の方法を力学系の問題に応用する研究が盛んに行われている．特に，区間演算に基づく数値計算とトポロジーやグラフ・アルゴリズムのアイディアを組み合わせて，常微分方程式などの連続時間の力学系や，写像の反復合成によって与えられる離散時間の力学系に対し，その大域的な解構造を調べる新しい方法が開発されてきている．本稿では，筆者の周辺で行われている研究を紹介し，そのような研究の今後の展望についても考えてみたい．

2. 力学系の大域的構造

本稿では力学系の大域的構造に対する計算機援用解析の新しい方法について紹介する．**力学系**とは，微分方程式や写像の反復合成（差分方程式あるいは漸化式）のように，初期値を決めればそこから出発する解が一意的に存在するようなルールによって与えられるシステムである．我々の周りには，時間とともに変化するような多種多様の現象があるので，それを数理的に定式化したものは自然に力学系と考えられることもよくある．従って理学，工学，生命科学や社会科学において力学系と捉えられる数理的モデルは非常に多く，その性質を理解することは重要な問題である．しかし，特殊な場合を除いて，数学的な解析だけではその時間発展の様子を理解することは困難であり，また，初期値をいろいろ選んで数値シミュレーションによって解を計算しようとしても，通常の数値計算方法では，有限個の初期値に対する有限時間の解が数値計算誤差を含んだ形で求めることになり，それだけでは直ちに力学系の大域的構造を理解することにはつながらない．

力学系の時間発展の様子を調べる際に基本となるのは，その「解」，すなわち，適当な初期値を与えて，その時間発展を追跡したものである．このような力学系の「解」は，微分方程式であれば解曲線を，写像の反復合成であれば点列を定める．これをその初期値に対する力学系の**軌道**と呼ぶ．特に初期点から出る解がずっとその初期点に留まっているような定常的な状態を**平衡点**または**不動点**といい，ある一定時間後に再び元の初期点に戻るような解の軌道を**周期軌道**という．力学系の相空間，すなわち力学系が定義されている空間に，様々な初期値から出る軌道を描いたものを**相図**という．力学系の大域的構造とは，大雑把に言えばこのような相図の全体的な様子のことである．

力学系の大域的構造をどのように理解するかという問題に対する解答は対象ごとに様々であるが，本稿ではそれを，回帰的な不変集合とその間の関係を理解することと考える．**不変集合**とは，相空間内の部分集合で，その中の点から出る軌道はずっとその集合内に留まるようなものをいう．不変集合の中でも**回帰的**な不変集合，すなわち，初期点の

いくらでも近くに何度でも「戻ってくる」ような軌道たちを集めた不変集合が重要である．この軌道の初期点への「戻り方」をどのように定義するかによって，いろいろなレベルの回帰性を持つ不変集合が定義できる．平衡点それ自身や周期軌道は不変集合であり，最も強い回帰性を持つが，それに対して最も弱い回帰性を持つ不変集合が**鎖回帰的不変集合**と呼ばれるものである．

鎖回帰的不変集合が最も弱い回帰性であるという理由は，鎖回帰的不変集合の外では，力学系は回帰性を全く持たず，軌道の振舞いは「一方向的」だからである．これを定式化した概念が**勾配的**ということである．力学系が勾配的とは，相空間上で定義された連続関数で，どの軌道に沿ってもその関数値が単調に減少するようなもの（ポテンシャル関数という）が存在することをいう．この場合には，その単調減少性から軌道が初期点の近くに戻ってくることは決してないので回帰性を持たない．数学者 C. Conley による「力学系の基本定理」[5,12]は大雑把に言えば，任意の力学系は鎖回帰的集合の外では勾配的である，ということを主張する大変一般的な定理であり，鎖回帰的不変集合が最も弱い回帰性を持つことを示すものである．我々はこの定理をお手本として，力学系の大域的構造を，鎖回帰的不変集合が表す「回帰的部分」と，その外での「勾配的なつながり」とに分解して理解しようと試みる．もちろん与えられた力学系の鎖回帰的不変集合やその外での勾配的構造を完全に理解することは，一般には不可能であるが，計算機を援用することで，それらの「外からの近似」を数学的に厳密な仕方で求めるだけでも，力学系について得られる情報は多いと期待される．

本稿で紹介するのは，力学系の大域的構造の上述の意味での「外からの近似」を数学的に厳密に与えられるような，計算機を援用した力学系の解析の新しい方法であり，筆者らの共同研究[1]で得られたものである．これは，精度保証付き数値計算とグラフを用いた計算手法，およびトポロジーのアイディア，特にホモロジー計算[4]に基づく Conley 指数によるダイナミクスの表現を融合したもので，それまでに開発された様々な理論[8,9]および計算ソフトウェア（例えばGAIO[6], CAPD[3] など）の発展の１つの到達点と言える．なお，本稿では，写像の反復合成による離散時間の力学系を対象とするが，連続時間の力学系についても同様の方法も可能であることを注意しておく．

3. 区間演算に基づく力学系の組合せ的解析

区間演算とは，簡単に言えば，通常の実数の代わりに実数の区間を用いて演算を行う計算法をいう．ある実数を表現する際に付随する誤差を包み込むような区間を取り，演算を行う場合にはそれによって生じる誤差も取り込んで，計算結果を区間として保持すれば，数学的に厳密に誤差評価をしながら数値計算を実行することが可能である．区間演算に基づいて，計算機を用いて解決できる数学的問題はいろいろある．例えば，ある写像 f と適当な集合 A が与えられたとき，その像 $f(A)$ を計算機で数学的に厳密に求めることは一般には不可能であるが，$f(A)$ の外近似，すなわち $f(A) \subset B$ となる集合 B を数学的に厳密に，しかも $f(A)$ にできるだけ近く求めるという問題は，f や A が計算可能な形で与えられれば，計算機で十分扱える問題である．以下では力学系の大域的構造の解析に関連してそのような問題を実際に取り扱う．また，微分方程式の重要な性質を持つ解の存在を検証することにも区間演算は用いられている．本稿では区間演算について詳しく述べる余裕はないので参考文献 10, 11) に譲るが，本特集号では区間演算を用いた様々な数学的問題へのアプローチが紹介されており，区間演算についてもいろいろな角度から解説されているので参照されたい．

本稿で紹介する力学系の大域的構造を計算機を用いて調べるための方法の概要は次のとおりである：まず相空間の中の調べたい有界領域を有限なグリッドに分割し，各グリッド要素の力学系による像を区間演算により求め，それを用いてグリッド要素の集合からそれ自身への多価写像を計算す

る．この多価写像が力学系の情報の外近似を与える．グリッド要素の全体は有限集合であることに注意すると，この多価写像を有限有向グラフとみなせるので，有向グラフに対する様々な計算アルゴリズムを用いて，力学系の大域的構造の情報をこの有向グラフから得られる．特に有向グラフの強連結成分として鎖回帰的集合の外近似が得られ，それに対する Conley 指数と呼ばれるダイナミクスの情報がホモロジー計算によって求められるのである．以下でこれをより詳しく説明する．

3.1 組合せ多価写像と力学系のグラフ表現

調べたい力学系が，n 次元空間 $\mathbb{R}^n$ 上の連続写像の d-パラメータ族

$$f\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^n;\ (x,\lambda) \mapsto f_\lambda(x) \qquad (1)$$

によって表現されているとする．具体的な例として，数理生物学における Leslie モデルと呼ばれるものの特殊な場合である 2 次元写像

$$f_\lambda(x_1,x_2) = \begin{pmatrix} (\theta_1 x_1 + \theta_2 x_2)\,\mathrm{e}^{-\kappa(x_1+x_2)} \\ p x_1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

を念頭において説明する．ここではパラメータ $\theta_1, \theta_2, \kappa, p$ のうちの $\kappa = 0.1, p = 0.7$ と固定して，$\lambda = (\theta_1, \theta_2)$ とした 2 パラメータ族と考える．この写像については計算機シミュレーションを用いた研究があり[13)]，様々な興味深いダイナミクスやその変化（分岐）が数値的に観察されている．

この Leslie モデルを調べるために，まずパラメータ λ を固定し，適当な有界領域，例えば第 1 象限にある長方形領域 $R = [0,a] \times [0,b]$ をとり，その長方形の各辺を 2^k 等分して得られるグリッド分割を考える．このグリッド分割の各要素は 2^{2k} 個の小長方形であり，それらを集めた有限集合を $\mathcal{B}_k$ と表す．このグリッド分割の小長方形 $G \in \mathcal{B}_k$ について，その像 $f_\lambda(G)$ を区間演算により計算する．区間演算では計算結果はまた区間となるので，今の場合は像として 2 次元長方形 H が得られ，それは真の像 $f_\lambda(G)$ を数学的に厳密な意味で包含する集合である（図 1）．なお，Leslie モデルの性質から，最初の長方形領域 R を十分大きく選んでおけば $f_\lambda(R) \subset R$ となることが確かめられるので，どのグリッド要素 G についても上のような長方形 H が R 内に得られるが，このことは一般の力学系ではもちろん成り立たないので，その場合には適当な工夫が必要である．ここではこのような技術的な細部にはこだわらないで話を進める．

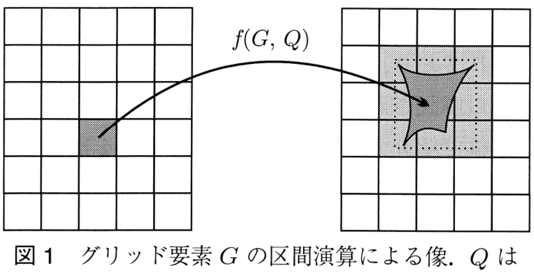


図 1　グリッド要素 G の区間演算による像．Q はパラメータ空間のグリッド要素．点線の長方形は像の区間による包含（本文の H）を表す．

この H と交わる R のグリッド分割のグリッド要素をすべて集めたものを $\mathcal{F}_\lambda(G)$ と定める．これはグリッド要素の集合であるので $\mathcal{B}_k$ の部分集合であり，従って $\mathcal{F}_\lambda$ は有限集合 $\mathcal{B}_k$ の各元に対し，$\mathcal{B}_k$ の部分集合を対応させるような $\mathcal{B}_k$ 上の多価写像を定めると考えられる．これを元の力学系 f_λ に対する**組合せ多価写像**という．

有限集合 $\mathcal{B}_k$ の元をグラフの頂点と考え，1 つの頂点 G から，$\mathcal{F}_\lambda(G)$ に含まれるそれぞれの元に対応する頂点に向うように辺を定めると，この組合せ多価写像 $\mathcal{F}_\lambda$ は有限有向グラフ Γ_λ とみなせる．このとき，写像 f_λ の定める力学系の軌道は Γ_λ の辺をたどる 1 つの道に対応する．もちろん組合せ多価写像の構成には区間演算による誤差が取り込まれているので，Γ_λ の道が必ずしも元の力学系 f_λ の真の軌道に対応するわけではないが，少なくとも力学系 f_λ の真の軌道は必ず Γ_λ の道を定めるという意味で，Γ_λ が元の力学系 f_λ の軌道の「外からの近似」となっていると考えられる．特に f_λ の周期軌道は Γ_λ のループ（閉路）に対応し，不動点はある頂点が自己辺（自分自身へ戻る辺）を持っていることに対応する．

3.2 Conley–Morse グラフ

元の力学系 f_λ の軌道が有向グラフ Γ_λ の道を定めることから，有向グラフ Γ_λ におけるループを調べることは力学系 f_λ の回帰的な振舞いを調べることに対応すると考えられる．一般に有向グラフ $\Gamma=(V,E)$ の**強連結成分**とは，その連結な部分グラフ Σ で，Σ の中のどの 2 つの頂点 v_1, v_2 に対しても，Σ の中で v_1 から v_2 にも v_2 から v_1 にも行けるものをいう．有向グラフ Γ_λ は有限グラフなので，その強連結成分は高々有限個しかなく，それらは互いに辺も頂点も共有しない．しかもその各強連結成分をそれぞれ 1 点につぶして得られる商グラフは自己辺を除くとループを持たないという意味で「勾配的」であることがわかる．その勾配的な構造を表現するものが，Γ_λ から構成される **Morse グラフ**と呼ばれる新たなグラフであり，次のように定義される：Morse グラフの頂点は Γ_λ の強連結成分であり，2 つの頂点 S_1, S_2 に対して S_1 から S_2 への辺があるということを，グラフ Γ_λ において強連結成分 S_1 から S_2 に辺で結べることと定義する．このようにして有限有向グラフ Γ_λ から，より簡略な有向グラフが構成される．これが Morse グラフである．強連結成分の定義から，S_1 から S_2 に辺で結べれば，S_2 から S_1 に辺で結べることはない（もし双方向きに辺で結べれば S_1 と S_2 は同一のより大きい強連結成分に含まれていなければならないからである）．従って Morse グラフには有向グラフとしてのループは自己辺以外は決して存在しない．これが勾配的ということである．特にこのことから，各強連結成分の間に順序関係を定義することができる．すなわち，Morse グラフにおいて S_1 から S_2 に向う辺があれば $S_1 > S_2$ であると定義して，これを推移的に拡張することで，Morse グラフの頂点集合に対して順序が定義される．この順序は，任意の 2 つの頂点の間に順序関係が定義されるわけではないので全順序ではない（そのことを強調するために半順序ともいう）ことに注意されたい．特にこの順序の意味での極小元に対応する強連結成分は，そこから出る辺を持たないという意味で「アトラクタ」であると言える．これがダイナミクスの意味でもアトラクタであることが示せる[1]．

Morse グラフは力学系の勾配的構造をよく表現しているが，各強連結成分に対応する回帰的なダイナミクスの情報はまだ何も与えていない．一般に回帰的なダイナミクスはあまりにも多様で，それを一般的な形で十分に表現することはほとんど不可能であるが，ダイナミクスの情報を取り出す 1 つの方法として，ここでは **Conley 指数**を用いる．これは力学系の**孤立不変集合**に対して定義されるトポロジーを用いた概念で，勾配的ベクトル場の不動点に対する Morse 指数の一般化として Conley[5] により提案されたものである．一般に，上のようにして得られた Morse グラフの 1 つの頂点，すなわちグラフ Γ_λ の 1 つの強連結成分 S をとり，S に含まれるグリッド要素の和集合 $|S|$ を考えると，その中の最大不変集合は孤立不変集合であることが示せる．このような Morse グラフの頂点に対応する孤立不変集合をこの Morse グラフの **Morse 成分**と呼ぶことにすると，Morse 成分については，その Conley 指数が自然に定義される．Conley 指数の中でも特にホモロジー Conley 指数という概念を用いると，CHomP などのホモロジー計算ソフトを利用してそれを計算機を用いて計算することも可能である．そこで，各 Morse 成分に，それに対応するホモロジー Conley 指数を付加することで，強連結成分の回帰的ダイナミクスの情報も含んだ力学系の大域的構造の表現が得られる．これを **Conley–Morse グラフ**と呼ぶ（図 2）．

実のところ，写像の反復合成として与えられる

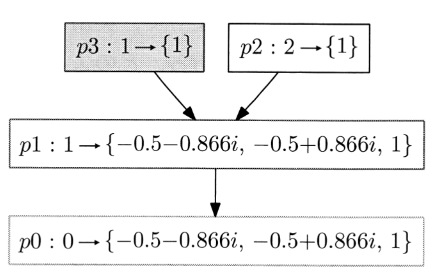


図 2　Conley–Morse グラフの例．例えば Morse 集合 $p0$ の 0 次元ホモロジー準同型写像の固有値が 1 の 3 乗根であることを示す．

力学系の孤立不変集合に対するホモロジーConley指数の定義は複雑であり，それを完全に計算するのは困難である．ホモロジーConley指数は，孤立不変集合とその「出口集合」と呼ばれる部分集合の対に対して，その空間対のホモロジー群の上に力学系から誘導されるホモロジー準同型写像のシフト同値類として定義される．これらの用語の正確な定義は文献1)を参照されたい．ここではそれと密接に関係するホモロジー準同型写像の（ベクトル空間の線型写像としての）固有値を計算することで代用する．これだけでもダイナミクスについてのある程度の情報が得られる．例えば，あるMorse成分のConley指数を与えるホモロジーが0次元以外ではすべて0であり，かつ0次元のホモロジー準同型写像の非零固有値が1のm乗根のみであるとすると，そのMorse成分である孤立不変集合はm個の部分集合に分かれて，それぞれがmを周期として周期的に移り合うような振舞いを持つことが示せる[1)]．この程度の情報からでも，周期的なダイナミクスやその変化に関する情報を取り出すことが可能である場合も多く，それが大域的なダイナミクスの理解の助けになると期待される．

Conley–Morseグラフは相空間のグリッド分割から得られるので，そこに含まれるダイナミクスの情報も，グリッド分割のサイズに強く依存する．粗い分割ではダイナミクスの情報がつぶれてしまい，意味のある情報が得られないことも多いので，分割を細かくするほうがダイナミクスについては多くの情報が得られるが，分割を細かくするとグリッド要素の個数が増えるので計算コストが大きくなり，計算時間も長くなって，実用的に意味がなくなってしまうこともある．どのようなグリッドサイズを選ぶかは，残念ながら今のところあまり有用な指針がなく，問題ごとに試行錯誤によって適切なものを選ぶ以外にはないのが実情である．

3.3 パラメータ空間と分岐

以上で説明したConley–Morseグラフは，単独の力学系f_λに対するダイナミクスの情報を与えるものである．力学系がパラメータλに依存するときには，パラメータの変動に伴うConley–Morseグラフの変化を見ることでダイナミクスの変化（すなわち力学系の分岐）についての情報も得られると考えられる．このようなパラメータの違いも考慮してConley–Morseグラフを求めるためには，まずパラメータ空間の調べたい領域を決めて，それをグリッドに分割する．1つのグリッド要素であるパラメータ空間内の小長方形Qを1つ選ぶことは，パラメータの微小な変動範囲を選ぶことに対応するが（図1），区間演算では力学系のパラメータ値も1つの区間として扱われるので，区間演算を用いることで，これまで説明した方法にパラメータの変動分を取り入れても，全く同様の仕方でConley–Morseグラフを得ることができる．

この方法で実際にLeslieモデルについて計算を行った結果が図3である．ここでは中央の長方形がパラメータ$\lambda = (\theta_1, \theta_2)$の範囲を示す長方形領域$[10, 50] \times [10, 50]$に対応し，その各辺を64等分した4096個の小長方形からなるグリッド分割をとっている．各パラメータのグリッド要素に対してConley–Morseグラフを求め，それが（ある判定方法により）同一であると判定されたパラメータ小長方形に同一の色を塗ることで，Conley–Morseグラフを見る限りは同一のダイナミクスとみなせるパラメータ領域，およびそれに対応するMorseグラフをグレースケールで色分けして表示している（実際のカラーの図や，それに対応するConley–Morseグラフなどのより詳しい情報は論文[1)]とそこにあるwebサイトを参照されたい）．

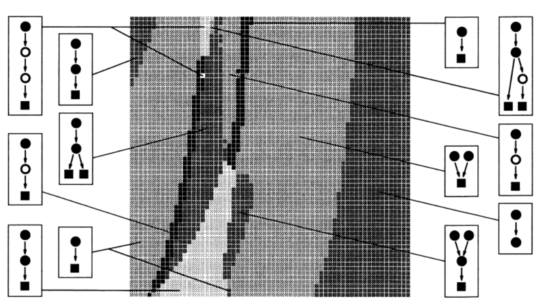


図3　LeslieモデルK対するMorseグラフのパラメータ図．

4. おわりに

本稿では力学系の大域的構造を調べるための計算機援用解析の1つの方法を紹介した．もちろん力学系の計算機援用解析は1970年代にはすでに始まり，様々な目的や観点からの多くの研究があるが，区間演算ソフトの普及や計算機のパワーの向上と低廉化により近年ますます盛んになっている．本稿で紹介した方法は，トポロジー的方法とグラフ・アルゴリズムを精度保証付き数値計算に融合させて，力学系の大域的構造や分岐を統合的に調べるものという意味で新しいと思われるが，基本的な部分はそれ以前に得られた多くの結果を利用している．このような研究の流れとその成果については，Mischaikowによる概説論文[9)]を参照されたい．また，同様のアイディアを用いた最近の関連する研究として，無限次元力学系の定常解の追跡と分岐（Zgliczynski–Mischaikow，平岡–小川–Mischaikow，松江），力学系の双曲性の検証（Hurska, 荒井，Wilczak, Day 他），などがある．これらについては概説論文[2,7)]を参照されたい．

計算機の能力は飛躍的に向上しており，スパコンを使わなくても相当に大規模の数値計算がより小さい計算機で可能になってきている．このような中で，区間演算を含む力学系の計算機援用解析の有用性は，多くの自然科学や工学などの分野において，今後，ますます高まると予想される．またそれに伴い，このような計算機援用解析の手法を発展させることが一層重要になってくるであろう．そのような中から，これまでの紙と鉛筆による数学的な解析や数値シミュレーションだけではなかなか見えてこなかった数学的な構造や捉え方が次第に明らかになることで，数学理論としても新しい展開が始まるのではないかと期待している．

謝辞： 本稿で紹介した結果は，荒井迅（北海道大学），W. Kalies（米国・Florida Atlantic 大学），K. Mischaikow（米国・Rutgers 大学），岡宏枝（龍谷大学），P. Pilarczyk（ポルトガル・Minho 大学）との共同研究によるものであり，記して感謝する．

参考文献

1) Z. Arai, W. Kalies, H. Kokubu, K. Mischaikow, H. Oka, P. Pilarczyk, A database schema for the analysis of global dynamics of multi-parameter systems, *SIAM J. Appl. Dynam. Sys.* **8** (2009), 757–789. `http://chomp.rutgers.edu/database/`も参照．

2) Z. Arai, H. Kokubu, P. Pilarczyk, Recent development in rigorous computational methods in dynamical systems, *Japan J. Indust. Appl. Math.* **26** (2009), 393–417.

3) *CAPD (Computer Assisted Proofs in Dynamics)*, `http://capd.wsb-nlu.edu.pl/`.

4) *CHomP (Computational Homology Project)*, `http://chomp.rutgers.edu/`.

5) C. Conley, *Isolated Invariant Sets and the Morse Index*, CBMS Regional Conference Series in Math., no. 38, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1978.

6) *GAIO (Global Analysis of Invariant Objects)*, `http://www.enm.bris.ac.uk/staff/hinke/dss/map/gaio.html`

7) 小特集「力学系の位相計算理論」応用数理 **15** (2005), 90–131; フォーラム「計算ホモロジーとその応用」応用数理 **18** (2008), 30–55.

8) T. Kaczynski, K. Mischaikow, M. Mrozek, *Computational homology*, Applied Mathematical Sciences, vol. 157, Springer-Verlag, 2004.

9) K. Mischaikow, Topological techniques for efficient rigorous computations in dynamics, *Acta Numerica* **11** (2002) 435–477（およびその参考文献）.

10) 中尾充宏，山本野人，『精度保証付き数値計算』，日本評論社，1998.

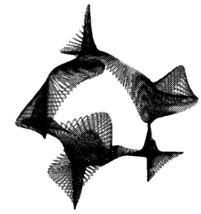
11) 大石進一，『精度保証付き数値計算』，コロナ社，1999.

12) C. Robinson, *Dynamical Systems*, Second Edition, CRC Press, 1999（邦訳もあり）.

13) I. Ugarcovici, H. Weiss, Chaotic dynamics of a nonlinear density dependent population model, *Nonlinearity* **17** (2004) 1689–1711.

（こくぶ・ひろし，京都大学大学院理学研究科／JST-CREST）

数値計算と計算幾何



尾崎　克久

1. はじめに

計算幾何学という分野は数理科学の一分野として認識され，特に情報科学，応用数学を専攻した方は，この名のついた講義を受講されたことがあるのではないかと想像している．そうではない場合も，凸包やボロノイ図といった言葉を聞いたことがある方は多いのではないかと思う．計算幾何学は工学への応用が多くあり，メッシュ生成・コンピュータグラフィックスなどには必要不可欠であろう．本稿では，この計算幾何学にある基礎的な問題の1つである，**点と直線の位置関係の判定問題**と呼ばれる問題を取り扱う．図1を見てほしい．2次元平面上に3点 A, B, C がある．点と直線の位置関係と名がつく通り，点 C が直線 AB の左側か右側かを判定するのが問題である．ただし，直線の左・右というのは曖昧であろう．例えば直線 AB が x 軸に平行ならば，左右といわれても困る．この判定問題は点 A と点 B をこの順で通過する向きのある直線（以後，**有向直線**と呼ぶ）と点 C の位置関係を判定するものである．人の目で判定すると，図1の場合はすぐに点 C は有向直線の左側にあることがわかり，計算などは必要ない．では目を閉じて，座標のみが頭に入っている場合に，この問題は解けるだろうか？ 例えば，A(0,0), B(2,4), C(9,1) としよう．直線は原点を通って傾きが2の右上がりの直線で，点 C の位置を考えるとこれは右側に存在！ とわかるだろう．これくらいであれば，イメージでも判定はできるだろう．では，目があるわけでもなく，イメージをすることもできない計算機はこの問題を判定できるのだろうか？ すなわち，計算機に座標だけを入力し，計算と条件分岐により判定を出すことを考える．この問題は

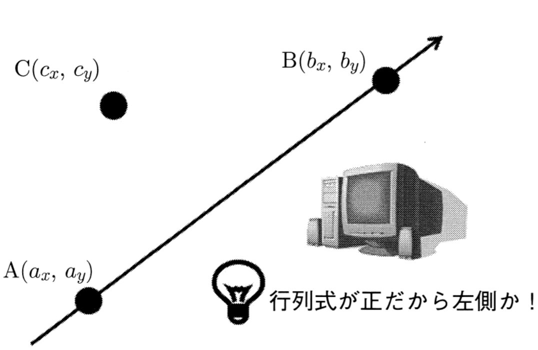


図1　有向直線と点の位置関係．

$$\mathrm{sign}(\det(G)),\ G := \begin{pmatrix} a_x & a_y & 1 \\ b_x & b_y & 1 \\ c_x & c_y & 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

という行列式の符号によって下記のように判定される：

- 正：点 C は有向直線 AB の左側にある．
- 負：点 C は有向直線 AB の右側にある．
- 0：点 C は有向直線 AB 上にある．

例えば図1の状況を A(1,1), B(2,2), C(1,5) として式 (1) を評価しよう．行列が3次であるので線形代数で習ったサルスの規則を用いて展開しても

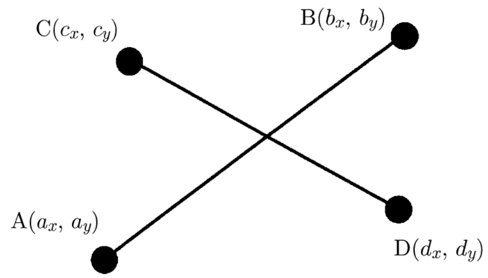


図 2　線分の交差判定.

よいし，基本的な性質を利用して行列を変形していっても良いだろう．いずれにせよ，行列式の値は 4 となり，正の値であるので「左側」と計算機は判断するのである．この理由は，符号付き面積と呼ばれるもので説明できるが，詳しい解説は計算幾何学の本を参考にしてほしい[5]．よって目がなく，イメージもできない計算機であっても，行列式の計算と符号の確認により，この問題は判定できるのである．

この問題は，計算幾何学の基礎判定問題の 1 つと紹介したが，この問題が応用される例を挙げよう．図 2 を見てほしい．2 次元平面上に 2 つの線分 AB と CD があり，それらが交差するかどうかを計算機が判定できる方法を考えよう．

交差をするときは

- 点 C と点 D は有向直線 AB に対して逆側に位置，
- 点 A と点 B は有向直線 CD に対して逆側に位置

という 2 点を確認すれば良い．すなわち，図 2 の状態でいえば，

- 点 C が有向直線 AB の左側にある，
- 点 D が有向直線 AB の右側にある，
- 点 A が有向直線 CD の右側にある，
- 点 B が有向直線 CD の左側にある

ことが，点と直線の位置関係を判定する行列式を計算して判定される．よって，線分の交差判定は，点と直線の位置関係を 4 回判定すればよく，計算機でも判定できるのである．

これは一例であるが，2 次元の計算幾何学の問題を解くアルゴリズムは，この点と直線の位置関係の判定を利用するものが多い．線分の交差判定以外にも，凸包を求めるアルゴリズムの多くは点と直線の位置関係の判定が必要である．この判定問題自身は非常に簡単ではあるが，幅広く応用されている問題なのである．

2. 数値計算と誤差

現在の計算機では数値計算は非常に高速である．例えば，著者がこの原稿を書いているラップトップ型計算機でも，1 秒間に少なくとも $9 * 10^9$ 回の計算が可能である．(1) の計算がこの計算機で 1 秒間に何回計算ができるかを考えれば，手計算とは比較にならない計算速度であることが想像できるだろう．計算幾何学の問題に対して，非常に多くの入力データがある場合には，この高速な計算機を利用することが非常に有用である．ただし，ここで言う「計算」とは**浮動小数点数**の形式で定義された数とその演算（**浮動小数点演算**）のことである．浮動小数点数は **IEEE 754 規格**[1]によって定義されているものが現在多く使用されている．具体的には

$$\pm\left(1+\frac{m_1}{2}+\frac{m_2}{2^2}+\cdots+\frac{m_n}{2^n}\right)*2^e$$

と表現される数である．m_1 から m_n までの情報が仮数部と呼ばれ，e を指数部と呼ぶ．m_i は 0 か 1 のいずれかである．整数 n と e については，単精度（binary32）・倍精度（binary64）等で異なるが，**倍精度浮動小数点数**である場合には，$n=52$, $-1022 \le e \le 1023$ である．本来であれば，規格化浮動小数点数・非規格化浮動小数点数・零などと分けて紹介すべきであろうが，本稿ではそれを省略し，厳密でない紹介をすることを許してほしい．理解してほしいことは，この形式では有限桁の精度しか保持できないという点である．また，IEEE 754 規格が定める**最近点への丸め**について簡単に触れておこう．10 進数で 2 桁の情報までしか保持できない数のフォーマットがあるとして，計算結果も必ずそのフォーマットに従わな

ければならないというルールがあるとする．ここで 1.8 や 1.7 はこのフォーマットで表現できる数であり，1.8*1.7 は 3.06 になる．ただし「計算結果も必ずそのフォーマットに従う」ルールがあれば，3.06 は 3 桁分の情報を持っているので困る．これは仕方がないので 3.1 と 2 桁分の情報にするのが「丸め」であり，失ってしまった 0.04 の情報が**丸め誤差**と想像してほしい．誤差により情報が落ちるときに，誤差が最小になるように数値を丸めることが最近点への丸めである．いわゆる 1.82 なら 1.8 に，1.69 なら 1.7 にするような四捨五入は想像できるだろう．このイメージを浮動小数点数の世界にあてはめてくれればほぼよい（厳密にいうと，**偶数丸め**という点が四捨五入のイメージとは異なる）．詳しくは数値計算の参考書や IEEE 754 規格などの解説を見てほしい．

表記を 1 つ紹介するが，$fl(\cdots)$ は括弧内をすべて IEEE 754 規格が定める浮動小数点演算（最近点への丸め）で評価することを意味する．本稿では，倍精度浮動小数点数とその演算を用いることを仮定する．浮動小数点数 a, b, c に対して，$fl(a+b+c)$ と記載した場合，これは $fl(fl(a+b)+c)$ と記載することと同じとする．すなわち a と b の和に対して浮動小数点演算を行い，結果を最近点に丸める．またその結果と c の和に対して浮動小数点演算を行い，結果を最近点に丸めることを意味する．よって，誤差は 2 回発生する可能性がある．浮動小数点演算の和と差に関して，オーバーフローがないと仮定すると

$$\begin{aligned} fl(x \pm y) &= (x \pm y)(1+\epsilon), \\ (x \pm y) &= fl(x \pm y)(1+\epsilon) \end{aligned} \tag{2}$$

が成立し，$|\epsilon| \le \boldsymbol{u}$ である．この $\boldsymbol{u}$ は roundoff unit と呼ばれ，倍精度浮動小数点数では $\boldsymbol{u} = 2^{-53}$ である．また，オーバーフローがないことを仮定すれば，積に関しては

$$(x * y) = fl(x * y)(1+\epsilon) + \eta$$

が成立し，倍精度浮動小数点数では

$$|\eta| \le 2^{-1075}, \quad \epsilon * \eta = 0$$

となる．なお，本稿では導出の簡略化のために，オーバーフローやアンダーフローのような例外は発生しないと仮定する．そのため，

$$(x * y) = fl(x * y)(1+\epsilon) \tag{3}$$

という式を用いて，4 節の解析を進める．

ここで実数演算と浮動小数点演算の違いを例にあげよう．実数演算では

$$(a+b) - a = b$$

であるが，浮動小数点演算では

$$fl((a+b) - a) = b$$

とは必ずしも言えないのである．$fl(a+b)$ に誤差があれば，最後に a を引いても b には戻らない．例えば $a = 1$，$b = 2^{-1000}$ とすれば，b は a に比べて相対的に小さすぎるので，

$$\begin{aligned} fl((a+b) - a) &= fl(fl(1 + 2^{-1000}) - 1) \\ &= fl(1-1) = 0 \end{aligned}$$

となる例はわかりやすいだろう．また

$$a * b > c$$

であっても

$$fl(a * b) > c$$

ではない例も見つけられる．よって式 (1) を浮動小数点演算で評価した場合，間違った符号を返してしまうこともある．数値計算の世界は，実数計算とは大きく異なる点を理解してほしい．

3. 数値計算と計算幾何

1 節では計算幾何学の紹介をし，2 節では数値計算の解説を行った．線分と線分の交差判定は，行列式を 4 回計算することで判定しようとしていたが，これらの計算値の符号が間違ってしまう可能性はある．すると，もちろん間違った判定，「本当は交差するのに交差しないと判定される」という結果も得られてしまうだろう．計算幾何学にある

アルゴリズムは非常にきれいで芸術的なものが多い．ただし，それを実現する手段が数値計算であると，丸め誤差の問題から思わぬ矛盾を生じてしまい，期待外れな結果を得てしまう可能性がある．Kettner らの論文にある，浮動小数点演算の誤差が引き起こす反例は非常に面白い[3]．凸包を求めようとしても，結果として凸包にならないのがなぜかという解説もある．

私は計算幾何と数値計算の関係は，建築家（計算幾何）と大工（数値計算）の関係だと思っている．建築家が非常に堅固な家を設計したとしよう．ただし，それを施行する大工さんの腕が悪かったら，はたして堅固な家は完成するだろうか？ 本当に仕事を丁寧すぎるほど丁寧に行う大工さん（多倍長精度計算など）は作業が遅い．作業が速い大工さん（数値計算）は，たまにミスをする可能性がある．ではどちらに依頼しようか $\cdots$ という悩みと同じだと思う．

今までの説明で，浮動小数点演算の誤差の問題を述べてきたので，読者は数値計算について悪い印象を持ったかもしれない．ただし，IEEE 754 規格による浮動小数点数とその演算の定義は非常に素晴らしいものであり，数値計算による (1) の評価は多くの場合で正しい．ただし，いつでも正しいとは言い切れないことから，数値計算を否定して数式処理・多倍長計算に依存するのは効率的ではない．その悩みの解決策として，数値計算の高速性を活かしたまま，数値計算自身の正確さを検証できることを次に紹介したい．

4. 浮動小数点フィルタ

計算幾何学における浮動小数点フィルタとは，計算値の符号が正しいかどうかを検証する技術であり，行列式の符号の正しさに関する十分条件を検証する．具体的には，浮動小数点演算による結果の符号が正しいことを

$$\text{計算値の絶対値} > \text{誤差の上限} \qquad (4)$$

により検証する．ここで計算値とは，式 (1) を浮動小数点演算で評価したものであり，

$$fl((a_x-c_x)(b_y-c_y)-(a_y-c_y)(b_x-c_x)) \quad (5)$$

としよう．もちろん行列式の評価の仕方はいろいろあり，

$$fl(a_xb_y - a_xc_y - c_xb_y - a_yb_x + a_yc_x + c_yb_x)$$

と評価もできる．ただし，(5) の演算回数が 7 回と少ないので，こちらが歓迎されるであろう．(4) の意味は，誤差があっても符号まで影響を及ぼすことはないから，計算値の符号は正しいという意味である．ただし，この誤差の上限をどのように求めるのかが問題である．この誤差の上限も浮動小数点演算により計算しなければならないが，誤差の上限の計算にも誤差が発生する $\cdots$ と考えると頭が痛いかもしれないが，議論をはじめよう[*1]．

式 (5) にある 7 回の演算について，下記の表記を用いる．

$$\begin{aligned}
&t_1 = a_x - c_x,\ x_1 = fl(a_x - c_x),\\
&t_2 = b_y - c_y,\ x_2 = fl(b_y - c_y),\\
&t_3 = a_y - c_y,\ x_3 = fl(a_y - c_y),\\
&t_4 = b_x - c_x,\ x_4 = fl(b_x - c_x),\\
&t_5 = t_1 * t_2,\ x_5 = fl(x_1 * x_2),\\
&t_6 = t_3 * t_4,\ x_6 = fl(x_3 * x_4),\\
&t_7 = t_5 - t_6,\ x_7 = fl(x_5 - x_6).
\end{aligned}$$

ここで t_7 は真の行列式の値を，また x_7 は (5) を表している．ここで，浮動小数点演算の性質 (2) と (3) により，

$$\begin{aligned}
&t_1 = (1+\epsilon_1)x_1,\\
&t_2 = (1+\epsilon_2)x_2,\\
&x_1x_2 = (1+\epsilon_3)x_5
\end{aligned}$$

が成立する．ここでインデックス付きの ϵ に対しては $|\epsilon_i| \le \boldsymbol{u}$ とし，この関係は以後のインデックスにも適用する．よって

*1) これからの議論は，Shewchuk[2] が行ったものを著者が少々手を加えた形で紹介する．また，荻田武史・東京女子大学准教授より有益なコメントをいただいた．

$$
\begin{aligned}
t_1 t_2 &= (1+\epsilon_1)x_1 \cdot (1+\epsilon_2)x_2 \\
&= x_1 x_2 + (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon_2)x_1 x_2 \\
&= x_5 + \epsilon_3 x_5 \\
&\quad + (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_1\epsilon_2)(1+\epsilon_3)x_5 \\
&= x_5 + (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_2 \\
&\quad + \epsilon_1\epsilon_3 + \epsilon_2\epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3)x_5
\end{aligned}
$$

を得る．ここで，

$$
\begin{aligned}
\delta_1 &= \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_2 \\
&\quad + \epsilon_1\epsilon_3 + \epsilon_2\epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_2\epsilon_3
\end{aligned}
$$

とすると，

$$
t_5 = t_1 t_2 = x_5 + \delta_1 x_5
$$

となり，δ_1 の取り得る範囲は

$$
-3\boldsymbol{u} + 3\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^3 \le \delta_1 \le 3\boldsymbol{u} + 3\boldsymbol{u} + \boldsymbol{u}^3
$$

となる．同様に，

$$
t_6 = t_3 t_4 = x_6 + \delta_2 x_6
$$

を得る．δ_2 の範囲は δ_1 と同じである．ここで

$$
x_5 - x_6 = (1+\epsilon_4)x_7
$$

といえるので，下記の式を導出できる．

$$
\begin{aligned}
t_7 &= t_5 - t_6 \\
&= x_5 - x_6 + \delta_1 x_5 - \delta_2 x_6 \\
&= (1+\epsilon_4)x_7 + \delta_1 x_5 - \delta_2 x_6 \\
&= (1+\epsilon_4)x_7 \\
&\quad + (1+\epsilon_4)/(1+\epsilon_4) * (\delta_1 x_5 - \delta_2 x_6) \\
&= (1+\epsilon_4)(x_7 + (\delta_1 x_5 - \delta_2 x_6)/(1+\epsilon_4)).
\end{aligned}
$$

上の式を見ると，$(1+\epsilon_4)$ 倍することは符号には影響しないため

$$
|x_7| > |(\delta_1 x_5 - \delta_2 x_6)/(1+\epsilon_4)| \tag{6}
$$

であれば，x_7 の符号は t_7 の符号と同じであることが保証される．ただし，不等式 (6) の右辺は浮動小数点数ではない可能性があり，浮動小数点演算のみを用いて不等式 (6) の右辺の上限をこれから計算する．$x_8 = fl(|x_5| + |x_6|)$ としたとき，

$$
|x_5| + |x_6| = (1+\epsilon_5)x_8 \le (1+\boldsymbol{u})x_8
$$

となる．よって不等式 (6) の右辺の上限を計算すると

$$
\begin{aligned}
&|(\delta_1 x_5 - \delta_2 x_6)/(1+\epsilon_4)| \\
&\le (3\boldsymbol{u} + 3\boldsymbol{u}^2 + \boldsymbol{u}^3)(|x_5| + |x_6|)/(1-\boldsymbol{u}) \\
&\le (3\boldsymbol{u} + 6\boldsymbol{u}^2 + 8\boldsymbol{u}^3)(|x_5| + |x_6|) \\
&\le (3\boldsymbol{u} + 6\boldsymbol{u}^2 + 8\boldsymbol{u}^3)(1+\boldsymbol{u})|x_8| \\
&= (3\boldsymbol{u} + 9\boldsymbol{u}^2 + 14\boldsymbol{u}^3 + 8\boldsymbol{u}^4)|x_8| \qquad (*)
\end{aligned}
$$

となる．ここで，$(*)$ の中にある $3\boldsymbol{u}+9\boldsymbol{u}^2+14\boldsymbol{u}^3+8\boldsymbol{u}^4$ が浮動小数点数ではないために，この数よりも大きい浮動小数点数 $3\boldsymbol{u} + 12\boldsymbol{u}^2$ を利用し，

$$
(*) \le (3\boldsymbol{u} + 12\boldsymbol{u}^2)|x_8| \qquad (**)
$$

を得る．よって，

$$
\begin{aligned}
(**) &= (1+\boldsymbol{u})^{-1}(1+\boldsymbol{u})(3\boldsymbol{u} + 12\boldsymbol{u}^2)|x_8| \\
&= (1+\boldsymbol{u})^{-1}(3\boldsymbol{u} + 15\boldsymbol{u}^2 + 12\boldsymbol{u}^3)|x_8|
\end{aligned}
$$

を得る．ここで，$3\boldsymbol{u} + 15\boldsymbol{u}^2 + 12\boldsymbol{u}^3$ は浮動小数点数ではなく，それよりも大きい浮動小数点数 $3\boldsymbol{u} + 16\boldsymbol{u}^2$ を利用し，

$$
\begin{aligned}
(**) &\le (1+\boldsymbol{u})^{-1}(3\boldsymbol{u} + 16\boldsymbol{u}^2)|x_8| \\
&\le (1+\boldsymbol{u})^{-1}(1+\boldsymbol{u})fl((3\boldsymbol{u} + 16\boldsymbol{u}^2)|x_8|) \\
&= fl((3\boldsymbol{u} + 16\boldsymbol{u}^2)|x_8|)
\end{aligned}
$$

という誤差の上限を得る．これは，$fl(\cdots)$ という表記の中にすべての数式が入っているため，浮動小数点演算のみで計算可能な値であることを強調しておく．ここで $3\boldsymbol{u} + 16\boldsymbol{u}^2$ は入力される座標に依存しないので，定数としてプログラムに与えればよい．この定数を α とすると，以上の議論から計算値 x_7 の符号が真の行列式の符号と同じであることの判定は

$$
|x_7| > fl(\alpha x_8) \tag{7}
$$

となる．ここで，アルゴリズムとして記載しよう．

Algorithm 1 α を $3\boldsymbol{u}+16\boldsymbol{u}^2$ という定数とし，2 点 $(a_x, a_y), (b_x, b_y)$ をこの順で通過する向きのある直線に対する点 (c_x, c_y) の位置関係を判断するための行列式の符号を正しく出力するアルゴリズム `filter`：

```
filter(a_x, a_y, b_x, b_y, c_x, c_y, α)
  left = fl((a_x − c_x)(b_y − c_y));
  right = fl((b_x − c_x)(a_y − c_y));
  det = fl(left − right);
  err = fl(α(|left| + |right|));
  if |det| > err
    return sign(det);
  end
  % 高精度な計算法へ移行など...
end
```

この表記を見てもらえば，$left, right, det$ は近似計算に必要な要素であるので，検証のための手間は err の計算と `if` の分岐のみである．よって，浮動小数点演算のみを使用する世界でも，誤差を含んだ計算値の符号が数学的に正しいという検証を高速に行うことが可能である．

ここで一点注意があるが，浮動小数点フィルタはあくまで計算の符号が正しいことを保証するためだけのもので，不等式 (7) が満たされないときに「計算値の符号が間違っている」とは言っていない．不等式 (7) が満たされなくとも，計算値の符号は正しいこともある．では，不等式 (7) が偽であるときはどうするか？ そのときは，多倍長精度計算を利用したり，数式処理を用いたりして正しい結果を得るとよいだろう．また数値計算に依存しない手法[4,6]も良い選択肢の 1 つである．ただし，点が直線に非常に近接したり，座標間に絶対値の大きなばらつきがある 3 点が与えられないかぎり，この浮動小数点フィルタは行列式の符号の正しさを保証することが可能である．よって，数値計算はその高速性を活かしながらも，結果に責任を持つことができるのである．浮動小数点フィルタには様々な分類があり，Static, Semi-Static, Dynamic という種類がある．興味がある読者は他の論文なども読んでほしい[7~9]．

本稿では，点と直線の位置関係の判定問題を取り上げたが，他にも似たような議論がある．ドロネー図を求めるアルゴリズムでは，点が円の内にあるか・外にあるかを判定する問題があるが，これも行列式の符号に帰着される．さらに，3 次元の世界では，点と平面の位置関係の判定や，点と球面の内外判定なども必要であり，これらも行列式の符号によって計算機は判定する．当然，これらにも数値計算による誤差の問題がつきまとうが，本稿で解説したような誤差評価を行えば浮動小数点フィルタは開発できる．多くの計算幾何学における基礎的な判定問題において，数値計算はその高速性を保ったまま，信頼性の検証が行えるのである．

参考文献

1) IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754–2008, 2008.
2) J.R. Shewchuk: Adaptive Precision Floating-point Arithmetic and Fast Robust Geometric Predicates, *Discrete & Computational Geometry*, **18**, 305–363, 1997.
3) L. Kettner, K. Mehlhorn, S. Pion, S. Schirra, C. Yap: Classroom Examples of Robustness Problems in Geometric Computations, *Computational Geometry*, **40**, 61–78, 2008.
4) 杉原厚吉：『計算幾何工学』，培風館 (1994).
5) 浅野哲夫：『計算幾何—理論の基礎から実装まで』，共立出版 (2007).
6) K. Sugihara: Robust geometric computation based on the principle of independence, *Nonlinear Theory and Its Applications*, Vol.**2**, No.1, 32–42, 2011.
7) G. Melquiond and S. Pion: Formally certified floating-point filters for homogenous geometric predicates, *Theoretical Informatics and Applications*, Special issue on Real Numbers, **41**, 57–69, 2007.
8) H. Brönnimann, C. Burnikel and S. Pion: Interval Arithmetic Yields Efficient Dynamic Filters for Computational Geometry, *Discrete Applied Mathematics*, **109**, 25–47, 2001.
9) V.Y. Pan, Y. Yu: Certification of Numerical Computation of the Sign of the Determinant of a Matrix, *Algorithmica*, **30**, 708–724, 2001.

（おざき・かつひさ，芝浦工業大学システム理工学部）

流体力学における精度保証付き数値計算

中尾　充宏

1. はじめに

筆者が**精度保証付き数値計算**（以下，「**数値的検証**」と同義に用いる）の研究に携わるようになって，早いものでもう四半世紀が過ぎようとしている．本稿は，特に流体力学上に現れる数学的問題に対する精度保証付き数値計算について述べることを主たる目的としている．しかしながら，そもそも筆者がこれまで追求してきた精度保証に対する意識が，**コンピュータを用いた解析学の展開**にあったので，ここでは，すこし範囲をゆるめて語ってみたい．即ち，筆者がどうしてこの分野の研究へと啓発されたのかも含めて，精度保証の考え方への入門的な話から始め，私どもがこれまでに蓄積してきた成果の中で，特に流体力学と関連したものを紹介しよう．

2.「精度保証」への誘い

筆者は，1985 年，次の本に巡り会った．
“Kaucher, W.E., Miranker, W.L., Self-validating numerics for function space problems, Academic Press, New York, 1984.”
そこには「解析学における無限次元の問題は，すべて計算機演算という有限操作で厳密に解決できる」といった調子で，関数方程式の解に対する精度保証付き数値計算が，極めて大胆に展開されていた．即ち，実数や行列などの四則演算を拡張して ‘ultra-arithmetic’ と呼ばれる演算規則を関数空間の要素にも導入する．そうすることによって関数方程式の解の精度保証は，あたかも通常の有限次元連立方程式のように扱うことができ，精度保証の議論はすべて区間演算に基づく計算機演算に帰着するという「仕掛け」であった．中身を見てみると，確かに一部の常微分方程式に対しては，そのような考え方もあり得るとは思われたが，偏微分問題に対してはとてもすんなり適用できるものではない，という印象であった．しかしながら，問題の解を数値計算することによって，数学的に厳密な存在証明を与える，という着想は従来の数値解析の枠を越えた非常に画期的なものに感じられた．筆者がこの本との出会いによって精度保証分野の研究に駆り立てられたことは間違いない．

一般に，ある未知量 x に関する方程式を

$$F(x) = 0 \qquad (1)$$

と書くとき，これを満たす x を求める問題は，もし有限次元（n 次元）ならばそれは n 元連立方程式の形になるであろう．しかしながら，(1) が関数方程式を意味する場合，それは無限次元の問題であり，言ってみれば $n = \infty$ であるから，どう考えても計算機上の数値計算によってその厳密解の存在や一意性を議論できそうには思えない．その後，常微分方程式に対しては，それをブレークする研究も既にいくつかなされていることがわかったが，偏微分方程式の場合には，未だその萌芽さ

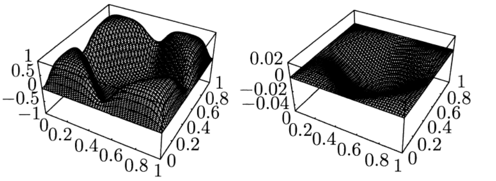


図 1 左側（u_N）と右側（v_N）はそれぞれ u および v の近似解．

え見えない状況であった．例えば，次の形をした連立微分方程式は，生物数学に関係した数理モデルにはよく登場する：

$$\begin{cases} -\varepsilon^2 \Delta u = u - u^3 - \delta v & \text{in } \Omega, \\ -\Delta v = u - \gamma v & \text{in } \Omega, \\ u = v = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \tag{2}$$

ここに $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ で，各パラメータを $\varepsilon = 0.04$, $\delta = 0.5$, $\gamma = -1.2$ として，これを数値的に解くと，図 1 のような解が得られる．図の近似解は，有限 Fourier 級数（項数：$N = 80$）を用いたスペクトル Galerkin 法で求めたものである．解の挙動は興味ある形をしているが，これはあくまでも数値解である．これらを見て，方程式 (2) に実際このような厳密解が存在することを保証できるだろうか？ そのような方法は全く見当がつかないが，それがもしできたなら，大変面白いことだし，自然現象の多くが偏微分方程式でモデル化されることを考えると，その意義はとてつもなく大きいであろう．筆者はその頃，**楕円型境界値問題**の Galerkin 法あるいは有限要素法による近似解の誤差評価について研究していたが，偏微分方程式こそは精度保証の最も魅力ある研究対象であろうと実感したのであった．

3. 具体的アプローチ

偏微分方程式に限らず，多くの精度保証付き数値計算では，問題の解を**不動点定式化**しておき，その不動点が存在する集合（しばしば**候補者集合**と呼ばれる）を数値的に特定するという方法がとられる．その場合，有限次元には Brouwer の不動点定理または縮小写像の原理が用いられ，無限次元の場合には Schauder あるいは Banach の不動点定理が使われることが多い．特に，無限次元の場合，Schauder の定理を用いるには，問題の解をコンパクト作用素 F の不動点 $x = F(x)$ の形にもちこむことが必須といってよい．そして，候補者集合 X に対して，その F による像を $F(X)$ とおくとき，

$$F(X) \subset X \tag{3}$$

なる包含関係を数値的に立証することによって，X の中に不動点が存在することを示す．Banach の不動点定理の適用には，さらに次の縮小性を数値的に検証することが求められる．ある正数 $\lambda < 1$ に対して

$$||F(x) - F(y)|| \le \lambda ||x - y|| \quad \forall x, y \in X \tag{4}$$

なお，Banach の不動点定理を用いる場合には写像 F のコンパクト性は表面上は不要のように見えるが，決してそのようなことはない．即ち，条件 (3) あるいは (4) を示すためには，写像 F の値域を数値計算で効率的に算定する必要があり，そのことはコンパクト性がない限り困難だからである．このことは，「コンパクト作用素の必要十分条件は有限次元作用素により一様近似可能なこと」という事実を反映したものといえよう．

4. 楕円型方程式に対する検証原理

ここでは，次節で扱う流体力学に関連した問題に対する解の精度保証（数値的検証）の基本概念として，次の非線形楕円型方程式に対する検証原理を述べておこう．

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x, u, \nabla u), & x \in \Omega, \\ u = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{5}$$

ここに，Ω は $\mathbf{R}^n$ $(1 \le n \le 3)$ の有界領域とする．問題 (5) の解を求める関数空間としては，斉次境界条件に対応する Sobolev 空間 $H_0^1(\Omega)$ $(\equiv H_0^1)$ が用いられる．写像 f には $H_0^1(\Omega)$ から $L^2(\Omega)$ への有界性や連続性が仮定される．問題を有限次

元化するために，H_0^1 の有限次元部分空間 S_h が用意され，そこへの**射影**とその**誤差評価**が必要となる．S_h は一般にはメッシュサイズ h の有限要素空間に対応するものである．いま，$L^2(\Omega)$ 上の内積を $(\cdot,\cdot)$ と表すとき，H_0^1 射影 $P_h : H_0^1 \to S_h$ を次で定義する．$\phi \in H_0^1$ に対し，

$$(\nabla\phi - \nabla(P_h\phi), \nabla v_h) = 0, \quad \forall v_h \in S_h. \quad (6)$$

このとき，次の誤差評価は**無限次元と有限次元（連続と離散）の橋渡し**の役割を果たすものである．

$$||(I - P_h)\phi||_{H_0^1} \le C(h)||\Delta\phi||_{L^2}. \qquad (7)$$

ここに，I は H_0^1 上の恒等写像を意味し，$C(h)$ は，$h \to 0$ のとき $C(h) \to 0$ となるような，**数値的に決定可能な正定数**とする．このような誤差評価は**構成的 a priori 誤差評価**とも呼ばれる．いま，各 $\psi \in L^2(\Omega)$ に対して，斉次境界条件の Poisson 方程式：$-\Delta\phi = \psi$ の解 $\phi \in H_0^1$ を対応させることを $\phi \equiv (-\Delta)^{-1}\psi$ と書くとき，(5) はコンパクト写像 $F \equiv (-\Delta)^{-1}f$ に対する不動点形式：$u = F(u)$ として表せる．

さて，問題の有限次元化の手がかりは，この不動点方程式を，S_h とその直交補空間 $S_h^\perp$ における，次の 2 つの関係式に分解することにある．

$$\begin{cases} P_h u = P_h F(u), \\ (I - P_h)u = (I - P_h)F(u). \end{cases} \qquad (8)$$

さらに，(8) の前半に Newton 的手法を適用するために，問題 (5) の近似解を $\widehat{u}_h \in S_h$ とするとき，$H_0^1(\Omega)$ から S_h への作用素 N_h を

$$N_h(u) := u - [P_h - P_h A'(\widehat{u}_h)]_h^{-1}(P_h u - P_h F(u))$$

と定める．ここに，$A'(\widehat{u}_h) \equiv (-\Delta)^{-1}f'(\widehat{u}_h)$ で，$f'(\widehat{u}_h)$ は f の $\widehat{u}_h$ における Fréchet 微分を表す．また，作用素 $[P_h - P_h A'(\widehat{u}_h)]_h^{-1} : S_h \to S_h$ は，$P_h[I - A'(\widehat{u}_h)] : H_0^1 \to S_h$ の S_h への制限に対する逆作用素である．いま，

$$T(u) := N_h(u) + (I - P_h)F(u)$$

とおくと，T はコンパクトで，2 つの不動点方程式 $u = T(u)$ と $u = F(u)$ とは同値となる．T は有限次元部分（前半）には Newton 法の効果が現れ，無限次元部分（後半）は，コンパクト作用素 F の一様近似（具体的には誤差評価 (7)）による縮小化が期待できる．このとき Schauder の不動点定理の適用条件は，H_0^1 の空でない有界凸閉集合 U に対し $T(U) \subset U$ が成り立つことである．計算機上での検証手順には，集合 U を求めるために区間 Newton 法的な反復が用いられる[8,15,21]．また最近では，上記の検証原理を用いて (5) の線形化逆作用素の存在とそのノルム評価を行い，無限次元 Newton 法の検証条件を直接立証する方法も用いられる[11,13,15]．

5. 流体方程式への適用

流体の方程式には，Navier–Stokes 方程式をはじめとして，実用上もまた応用解析学上でも重要でかつ興味深いものが多い．数学的性質の研究にも多くの数理解析学者が携わってきたにも関わらず，依然として理論的解明に至っていない部分も多く，その意味からも数値的検証がその真価を発揮できる対象といえる．本節では，これまでに筆者が携わったいくつかの問題について，その出会いから，検討の経緯と結果の概要，そして将来への展望などを述べる．

5.1 定常 Navier–Stokes 方程式

よく知られているように，斉次境界条件をもつ非圧縮性定常流は，次の Navier–Stokes 方程式で記述される．

$$\begin{cases} -\nu\Delta\boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} + \nabla p = \boldsymbol{f} & \text{in} \quad \Omega, \\ \text{div}\ \boldsymbol{u} = 0 & \text{in} \quad \Omega, \\ \boldsymbol{u} = 0 & \text{on} \quad \partial\Omega. \end{cases} \qquad (9)$$

ここに $\boldsymbol{u}$ と p はそれぞれ流速ベクトルと圧力を意味し，$\boldsymbol{f}$ は与えられた外力項で，$\nu > 0$ は粘性係数．方程式 (9) は連立非線形楕円型問題と見なされる．したがって，もし前節で述べた楕円型方程式の解の精度保証方式を Navier–Stokes 問題にまで拡張しようとすれば，Poisson 方程式に対応

するものは，次の Stokes 方程式であることが予想できよう．

$$\begin{cases} -\nu\Delta\boldsymbol{u}+\nabla p=\boldsymbol{g} & \text{in} \quad \Omega, \\ \operatorname{div}\boldsymbol{u}=0 & \text{in} \quad \Omega, \\ \boldsymbol{u}=0 & \text{on} \quad \partial\Omega. \end{cases} \tag{10}$$

いま，流速および圧力に関し，それぞれの有限要素空間が用意され，(10) の解 $(\boldsymbol{u},p)$ の射影としてその近似解 $(\boldsymbol{u}_h,p_h)$ が定義できたものとし，それぞれ

$$\begin{aligned} &\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_h\|_{H_0^1}\le C_1(h)\|\boldsymbol{g}\|_{L^2}, \\ &\|p-p_h\|_{L^2}\le C_2(h)\|\boldsymbol{g}\|_{L^2} \end{aligned} \tag{11}$$

なる形の構成的誤差評価が得られれば，前節に述べた精度保証方式が適用できる．実際，2 次元の場合にはそのような評価が可能であり，いくつかの数値的検証が実現されている[9,12,17]．しかしながら，3 次元問題に対しては，球領域などの特殊な場合を除いて (11) の形の構成的誤差評価を得る方法が見つかっておらず，現在のところ未だ手つかずの状況にある．一方，2 次元の場合には，よく知られているように，(9) は，$\boldsymbol{u}=(\psi_y,-\psi_x)$ を満たす流れ関数 ψ を導入することによって，次の 4 階方程式に変換される．

$$\begin{cases} \nu\Delta^2\psi=J(\psi,\Delta\psi)+(f_2)_x-(f_1)_y \ \text{ in } \Omega, \\ \psi=\dfrac{\partial\psi}{\partial n}=0 \ \text{ on } \partial\Omega. \end{cases} \tag{12}$$

ここで，J は双一次形式 $J(u,v):=-u_xv_y+u_yv_x$ であり，$\frac{\partial}{\partial n}$ は外向き法線微分である．この場合，各 $\phi\in L^2$ について (12) と同じ境界条件の重調和方程式：$\Delta^2u=\phi$ の近似解に対する構成的誤差評価が必要となる．そのためには解 u に対し，その H^4 ノルム（関数 u のすべての 4 階微分の L^2 ノルム）を $\|\Delta^2u\|_{L^2}$ で構成的に評価する必要があるが，それは Poisson 方程式の場合のようには簡単でない．例えば，Ω が矩形領域の場合にも一般的には難しいが，特殊な場合についてのみ，計算機援用の形で構成的な a priori 誤差評価が可能となり，その結果を用いて (12) の解が検証されている[7]．

5.2 熱対流問題

筆者が熱対流問題の解の精度保証に関わるようになったのは，流体方程式の理論研究で名高い京都大学（現早稲田大学）の西田孝明先生との交流がもとであった．よく知られるように，Bénard は，溶けた鯨の脂を皿の上に置き，下から加熱したとき，表面に図 2 のような六角形パターンが現れることを発見し (1900)[22]，その後 Rayleigh は，この現象の数理モデルを構成しその理論的解析を行った (1916)．そのモデルは，Boussinesq 近似と呼ばれる次のような Navier–Stokes 方程式と熱伝導方程式の連立系で表現される．

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\mathcal{P}}\boldsymbol{u}\cdot\nabla\boldsymbol{u}+\nabla p=\Delta\boldsymbol{u}+\mathcal{R}\theta\nabla z, \\ \boldsymbol{u}\cdot\nabla\theta=\Delta\theta+w, \\ \operatorname{div}\boldsymbol{u}=0. \end{cases} \tag{13}$$

ここに，$\boldsymbol{u}$ と p は前と同様，θ は流体の温度で，$\mathcal{R}$ と $\mathcal{P}$ は，それぞれ，Rayleigh 数および Prandtl 数と呼ばれる定数である．$\mathcal{R}$ と $\mathcal{P}$ をパラメータとしたとき，(13) の**分岐解の大域構造**については未だ理論的にはほとんど解明されていない．2 次元の場合には，流れ関数を導入すれば，問題 (13) は，4 階と 2 階の楕円型システムに帰着される．適当な境界条件の下に，解を探す空間を 2 重 Fourier 級数表示可能な関数集合に限定すると，スペクトル法による構成的誤差評価も比較的容易に得られる．したがって前に述べた検証法はそのまま適用でき，種々の Rayleigh 数に対する非自明分岐解の存在が検証されている[18]．また，既存の分岐理論

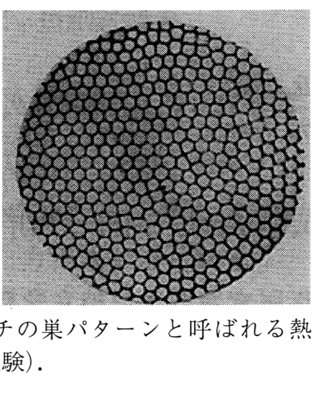


図 2　ハチの巣パターンと呼ばれる熱対流現象（実験）．

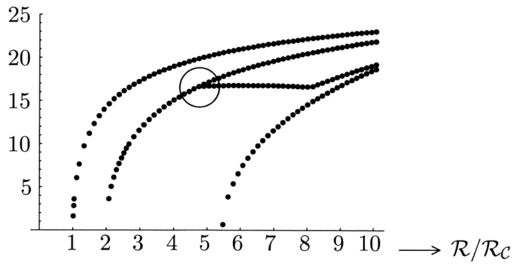


図 3　存在が検証された分岐解(各ドット)と分岐点(丸で囲んだ部分)．$\mathcal{R}_{\mathcal{C}}$: 臨界 Rayleigh 数．

では証明できない分岐曲線の存在が検証され，一つの分岐曲線上に新たな 2 次分岐（対称性破壊分岐）が起こることも厳密に検証されるなど，いくつかの新たな知見が得られている（図 3）[14]．一方，3 次元の場合，流れ関数はもはや使えず，(13) はそのままの形で扱わねばならないが，この場合にも，3 重 Fourier 級数展開を前提として，検証の定式化ができ，現在相対 Rayleigh 数が 1 からあまり遠くないところでは，検証が実現されている[2]．今後計算機の能力向上により，いくつもの興味深い分岐構造が数値的に解明される日が来るであろう．

5.3 Orr–Sommerfeld 固有値問題

非圧縮性流体の 2 次元平行流に関する線形化された安定特性は，Orr–Sommerfeld 方程式によってモデル化されるが，それが非自己共役型の固有値問題となるため，理論的扱いが難しい問題の一つである．これはドイツ Karlsruhe 大学の Plum 教授から共同研究の提案を受けて取り組んだものであり，Poiseuille 流に対しその精度保証付き解析が行われている．この場合，Orr–Sommerfeld 固有値問題は，区間 $\Omega = [x_1, x_2]$ 上で次の形となる．

$$\begin{cases} (-D^2+a^2)^2 u \\ \qquad + iaR[V(-D^2+a^2)+V'']u \\ \qquad\qquad = \lambda(-D^2+a^2)u, \\ u(x_1)=u(x_2)=u'(x_1)=u'(x_2)=0. \end{cases} \tag{14}$$

ここで，$D=\frac{d}{dx}$，i は虚数単位，$a>0$ は摂動の波数と呼ばれるパラメータであり，R は Reynolds 数を表す．また，V は C^2 の滑らかさをもつ定常流の流れ形状（flow profile）を意味する．解明すべき流れの安定特性として，(14) に実部が負の固有値 λ が存在すること（不安定性）の検証と，与えられた R と a に対して安定であること（すべての固有値の実部が正）の証明という 2 つの課題がある．

不安定性が起こることの証明

これは，(14) に対し $Re(\lambda)<0$（実部が負）となるような固有値 λ の存在を精度保証付きで示すことである．それには，与えられた R と a に対し，(14) の固有値を精度保証付きで求め，その実部の符号をチェックすればよい．これは前節で述べた検証原理を拡張することによって定式化できる[10]．この定式化の下にいろいろな R と a の組合せに対し，不安定性の現れることが数値的に検証されている[19]．一般に，a が与えられたとき，十分小さな R に対しては流れが安定であることが知られており，どのくらい大きな R のとき $Re(\lambda)<0$ となるか，即ち，不安定性が出現するかということも重要な問題である．図 4 は，種々の波数 a に対して，初めて実部が負の固有値が検証された R の値をプロットしたものである．ただし，この段階の数値検証では，与えられた波数 a に対して，図にプロットされた R では確かに実部が負の固有値が存在するが，**それより小さい R に対しては，実部が負になる固有値は存在しないという主張はできないことに注意．**即ち，あくまでも "numerical evidence" として，そのように見えるだけである．

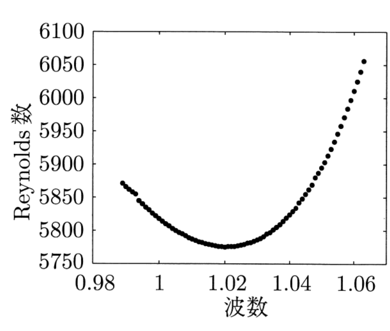


図 4　$[a, R]$ with $Re(\lambda)<0$.

安定性の証明

さて，与えられた R と a に対して安定であることを証明するには，(14) のすべての固有値の実部が正であることを示さねばならない．言い換えれば，複素平面上で，**実部が正の範囲には一つも固有値がないこと**を検証する必要がある．複素平面のある有界な領域について，固有値が存在しないことは，やはり前節での検証原理を用いた固有値除外法（eigenvalue excluding method）の定式化によって検証できる[10)]．また，幸いにも（！），理論的な結果を援用すれば，安定問題は，複素平面のある有界な範囲に固有値が存在しないことを示せばよいことがわかっている．例えば，いま $R=2500, a=1.019$ の場合，(14) のすべての固有値は図 5 の薄く網掛けした範囲に存在することが理論的に示されている．同図のドットは近似固有値の分布を表す．なお，図 6 は図 5 を局所的に拡大したものである．こうして筆者らは，図 5 および図 6 に示すような複素平面上の小さな円領域毎に固有値が存在しないことを数値的に検証し，その和集合が所望の領域を完全に被覆することを確認し，左半平面に一つも固有値がないことの証明に成功した[20)]．

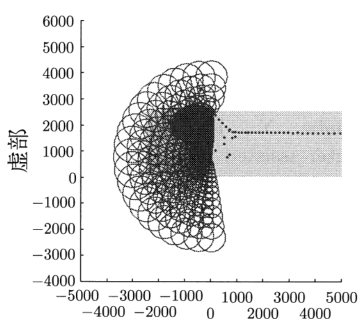


図 5　固有値を除外できた円領域．

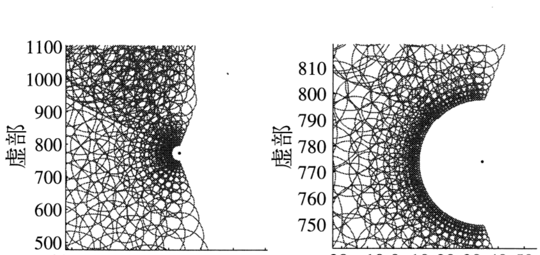


図 6　固有値を除外できた円領域（図 5 の局所拡大）．

5.4 Kolmogorov 問題

これは，トーラス上を流れる非圧縮性定常流の安定性を議論する問題であり，それは 2 次元領域 $[-a,a]\times[-b,b]$ 上の周期境界条件を課した定常 Navier–Stokes 問題としてモデル化される．分岐解の安定性では線形化作用素の固有値が問題となるが，この場合の安定性解析は大変複雑であり，固有値以外に固有関数の挙動も関係する．いま，流れ関数を用いて，Navier–Stokes 方程式を 4 階単独方程式に変換した上で，適当な変数変換を施すと，考える領域は $\boldsymbol{T}_\alpha\equiv[-\frac{\pi}{\alpha},\frac{\pi}{\alpha}]\times[-\pi,\pi]$ の形となる．ここで，$\alpha\equiv\frac{b}{a}$ はアスペクト比と呼ばれる．このとき安定性の議論は，領域 $\boldsymbol{T}_\alpha$ 上の楕円型作用素：

$$L_{R,\alpha}\phi\equiv\frac{1}{R}\Delta^2\phi-\sin y(\Delta+I)\frac{\partial\phi}{\partial x}\qquad(15)$$

がゼロ固有値もつような Reynolds 数 R，および対応する固有関数の性質を調べることに帰着する．α の値が，0 あるいは 1 に十分近いところでは，理論的考察によって流れの安定性が証明されているが，一般の α では不明である．安定性の議論には作用素 $L_{R,\alpha}$ がゼロ固有値をもつような R と対応する固有関数 ϕ，さらに共役作用素 $L^*_{R,\alpha}$ のゼロ固有値（R と一致）に対する固有関数も必要となる．この場合も前節の検証原理を用いてこれらの量を精度保証付きで求め，それらを用いて $\alpha=0.4,\ 0.7,\ 0.8$ について流れが安定であることの数値的証明が実現されている[6)]．

6. おわりに

本稿では，流体力学に関連した問題に対する精度保証付き数値計算の実現例として，筆者が直接関与したものについて述べたが，この他にもいくつかの検証例がある．例えば，2 次元 Navier–Stokes 方程式の周期解の検証[1)]や，連続で周期的な波の運動を記述する Nekrasov 方程式[3,5)] あるいはその極限波[4)]に関する数値的証明などが得られてい

る．また，大石進一先生をリーダーとする早稲田大学の研究グループは，Kantorovich の定理を適用する検証原理の提案[16]など，偏微分方程式の精度保証にも新たな成果を上げつつあり，今後流体方程式への貢献も大いに期待される．いずれにせよ流体力学には，精度保証付き数値計算がその本領を真に発揮できる話題が極めて豊富であり，この分野に対する研究への関心が高まることを願ってやまない．

参考文献

1) Heywood, J.G., Nagata, W., Xie, W., A numerically based existence theorem for the Navier–Stokes equations, *Journal of Mathematical Fluid Mechanics* **1** (1999), 5–23.
2) Kim, M.-N., Nakao, M.T., Watanabe, Y., Nishida, T., A numerical verification method of bifurcating solutions for 3-dimensional Rayleigh-Bénard problems, *Numerische Mathematik* **111** (2009), 389–406.
3) Kobayashi, K., Numerical verification of the global uniqueness of a positive solution for Nekrasov's equation. *Japan J. Indust. Appl. Math.* **21** (2004), 181–218.
4) Kobayashi, K., On the global uniqueness of Stokes' wave of extreme form. *IMA J. Appl. Math.* **75** (2010), 647–675.
5) Murashige, S., Oishi, S., Numerical Verification of Solutions of Nekrasov's Integral Equation, *Computing* **75** (2005), 15–25.
6) Nagatou, K., A computer-assisted proof on the stability of the Kolmogorov flows of incompressible viscous fuid, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **169** (2004), 33–44.
7) Nagatou, K., Hashimoto, K, Nakao, M.T., Numerical verification of stationary solutions for Navier–Stokes problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **199** (2007), 424–431.
8) 中尾充宏・山本野人：『精度保証付き数値計算』，日本評論社 (1998).
9) Nakao, M.T., Yamamoto, N. & Watanabe, Y., A posteriori and constructive a priori error bounds for finite element solutions of Stokes equations, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **91** (1998), 137–158.
10) Nakao, M.T., Yamamoto, N. & Nagatou, K., Numerical verifications of eigenvalues of second-order elliptic operators, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* **16** (1999), 307–320.
11) Nakao, M.T., Hashimoto, K. & Watanabe, Y., A numerical method to verify the invertibility of linear elliptic operators with applications to nonlinear problems, *Computing* **75** (2005), 1–14.
12) Nakao, M.T., Hashimoto, K., Kobayashi, K., Verified numerical computation of solutions for the stationary Navier–Stokes equation in nonconvex polygonal domains, *Hokkaido Mathematical Journal*, Vol.**36**, Special Issue, Proceedings on "The First China-Japan-Korea Joint Conference on Numerical Mathematics" (2007), 777–799.
13) 田端正久・中尾充宏：『偏微分方程式から数値シミュレーションへ／計算の信頼性評価』，現代技術への数学入門シリーズ，講談社 (2008).
14) Nakao, M.T., Watanabe, Y., Yamamoto, N., Nishida, T., Kim, M.-N., Computer assisted proofs of bifurcating solutions for nonlinear heat convection problems, *Journal of Scientific Computing* **43** (2010), 388–401, Proc. International Conference on Recent Developments of Numerical Schemes for Flow Problems (INSF2007, Fukuoka, Japan).
15) 中尾充宏・渡部善隆：『実例で学ぶ精度保証付き数値計算—理論と実装—』（仮題），サイエンス社 (2011)（出版予定）.
16) Oishi, S., Takayasu, A., Kubo, T., Numerical verification of existence for solutions to Dirichlet boundary value problems of semilinear elliptic equations, to appear in *Journal of Computational and Applied Mathematics.*
17) Watanabe, Y., Yamamoto, N. & Nakao, M.T., A numerical verification method of solutions for the Navier–Stokes equations, *Reliable Computing* **5** (1999), 347–357.
18) Watanabe, Y., Yamamoto, N., Nakao, M.T., Nishida, T., A Numerical Verification of Nontrivial Solutions for the Heat Convection Problem, *Journal of Mathematical Fluid Mechanics* **6** (2004), 1–20.
19) Watanabe, Y., Plum, M., Nakao, M.T., A computer-assisted instability proof for the Orr–Sommerfeld problem with Poiseuille flow, *Zeitschrift fuer Angewandte Mathematik und Mechanik* (ZAMM) **89** (2009), 5–18.
20) Watanabe, Y., Nagatou, K., Plum, M, Nakao, M.T., A computer-assisted stability proof for the Orr–Sommerfeld problem with Poiseuille flow, *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, vol.**2**, no.1, (2011), 123–127.
21) Yamamoto, N., Nakao, M.T., Numerical verifications for solutions to elliptic equations using residual iterations with higher order finite element, *Journal of Computational and Applied Mathematics* **60** (1995), 271–279.
22) Bénard, H., Les toubillons cellulaires dans une nappe liquide, *Revue Gén. Sci. Pure Appl.* **11** (1900), 1261–1271, 1309–1328.

（なかお・みつひろ，佐世保工業高等専門学校）

固有値問題における数値計算の発想



杉原　正顯

1. はじめに

「固有値問題における数値計算の発想」というお題を頂戴し，どんなことを書こうか悩んでいるとき，編集の方から「可能な限り学部生の方にも読んでいただけるようにしたいと考えております」というメールを頂戴した．そこで，本稿では，思い切って，線形代数の基礎を学んだ学部生の方々にも理解できる形で，固有値計算の基本アルゴリズムである QR 法（20 世紀における Top 10 アルゴリズム[2]にも選定されている）について，どんな発想で導かれるかを説明したいと思う[*1]．もちろん，歴史的には紆余曲折の末に QR 法が登場したのであり，以下に述べるような直線的発想に基づいて現れてきたわけではない．このあたりの歴史も興味あるところであるが紙数の都合で割愛せざるを得ない．文献 5, 6) を参照されたい．また，本稿のタイトルを見て，固有値計算の新しいアルゴリズムに関する情報を期待された方には申し訳ない限りであるが，文献 1) などを参照されたい．

2. QR 法

まず，QR 法について説明するために，行列の QR 分解について説明する．以下，実 n 次正方行列 A（正則とする）を考える．このとき，行列 A は n 次直交行列 Q と n 次上三角行列（右上三角行列ということもある）R の積

$$A = QR \tag{1}$$

に分解できる．この分解を **QR 分解**とよぶ[*2]．ここで，上三角行列とは，以下のように対角成分から上に成分がある（つまり，対角成分から下の成分が 0 の）行列である：

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * \\ & & * & * & * \\ & & & * & * \\ & & & & * \end{bmatrix}. \tag{2}$$

なお，QR 分解において，R の対角成分の符号は任意にとれて，これを固定すれば分解は一意である．

この QR 分解は，行列 A を n 本の縦ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ の並びと見なしたとき，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ から，Gram–Schmidt の直交化法によって，正規直交系 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n$ を作る操作：

$$r_{11} = \sqrt{(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_1)}, \quad \boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{a}_1 / r_{11},$$
$$r_{12} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_2), \quad \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{a}_2 - r_{12}\boldsymbol{q}_1,$$
$$r_{22} = \sqrt{(\boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_2)}, \quad \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{v}_2 / r_{22},$$

さらに $k = 3, \cdots, n$ に対して

$$r_{ik} = (\boldsymbol{q}_i, \boldsymbol{a}_k) \quad (i = 1, 2, \cdots, k-1),$$
$$\boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik}\boldsymbol{q}_i,$$
$$r_{kk} = \sqrt{(\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_k)}, \quad \boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{v}_k / r_{kk}$$

を計算する．
の結果を行列で表現したものである．実際，上の操作

*1) 本稿の内容は専門家にとっては良く知られた内容であり，新規性を問うものではない．

*2) 直交行列は orthogonal matrix であるにも関わらず，なぜ Q という文字が使われてるかという疑問がわく．文献 10) によれば，QR 分解を最初に導入した Francis の論文 3, 4) の元原稿では，O が使ってあったが，ゼロ行列と混同しないようにということで Q になったという「噂」とのことである．

を変形すると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}_1 &= r_{11}\boldsymbol{q}_1,\\
\boldsymbol{a}_2 &= r_{12}\boldsymbol{q}_1 + r_{22}\boldsymbol{q}_2,\\
&\ \vdots\\
\boldsymbol{a}_k &= \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik}\boldsymbol{q}_i + r_{kk}\boldsymbol{q}_k,\\
&\ \vdots
\end{aligned}
$$

となり，$\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n$ を並べた n 次直交行列を Q，上記の r_{ik} を成分とした上三角行列を R とすると，この一連の式は $A = QR$ とまとめて書くことができる*3)．

QR 法（基本形）は，この QR 分解を用いて，$A_0 = A$ として，$k = 0, 1, \cdots$ に対して，次のようにして A_k から A_{k+1} を計算する方法である：

$$A_k = Q_k R_k \quad (A_k \text{ を QR 分解する}), \tag{3}$$

$$A_{k+1} = R_k Q_k \quad (R_k \text{ と } Q_k \text{ の積を計算する}). \tag{4}$$

適当な条件下に，A_k は，対角成分から下の成分が 0 に収束し，対角成分が A の固有値に収束する．A が対称行列の場合，(3), (4) より $A_{k+1} = Q_k^{\mathsf{T}} A_k Q_k$ が成り立つから，A_k は対称行列となり，A_k は対角成分が A の固有値の対角行列に収束する．一見不思議な方法であるが，以下，対称行列の場合には，実はそんなに不思議な方法でなく，固有値計算における最も素朴なアルゴリズム，べき乗法から比較的自然に導かれることを説明する．非対称行列の場合は，少し面倒なことになるが，対称行列の場合の類推から，ある程度納得してもらえる説明を与えたいと思う．

3. べき乗法から QR 法へ（対称行列の場合）

行列 A は正則かつ対称とし，簡単のため，固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, n)$ は絶対値がすべて異なるとし，

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| \tag{5}$$

と番号をつける．そして，それぞれの固有値に対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_n$ とする（長さは 1 に正規化してあるものとする）．なお，絶対値最大の固有値を優越固有値とよぶ．

3.1 べき乗法

まず，事実「適当に初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ をとって，A のべき乗を掛けていくと，$A^k\boldsymbol{x}_0$ は優越固有値 λ_1 に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$ と同じ方向に向いていく（すなわち，ある実数 α_k が存在して，$\alpha_k A^k \boldsymbol{x}_0$ が $\boldsymbol{z}_1$ に収束する）.」に注目する．この事実は容易に証明できる．実際，初期ベクトルを，固有ベクトルを用いて，$\boldsymbol{x}_0 = \sum_{i=1}^{n} c_i \boldsymbol{z}_i$ と展開すると，

$$A^k\boldsymbol{x}_0 = \sum_{i=1}^{n} c_i {\lambda_i}^k \boldsymbol{z}_i \tag{6}$$

$$= {\lambda_1}^k \left[c_1\boldsymbol{z}_1 + \sum_{i=2}^{n} c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \boldsymbol{z}_i \right]$$

$$= {\lambda_1}^k \left[c_1\boldsymbol{z}_1 + \mathrm{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \right) \right] \tag{7}$$

であるから，$c_1 (= \boldsymbol{x}_0^{\mathsf{T}}\boldsymbol{z}_1) \neq 0$ ならば，$A^k\boldsymbol{x}_0$ の方向は $\boldsymbol{z}_1$ の方向に収束していく．条件 $c_1 (= \boldsymbol{x}_0^{\mathsf{T}}\boldsymbol{z}_1) \neq 0$ は $\boldsymbol{x}_0$ が $\boldsymbol{z}_1$ 成分をもつことを意味するが，$\boldsymbol{x}_0$ を乱数などでとれば通常満たされる．したがって，$k = 1, 2, \cdots$ に対して，$A^k\boldsymbol{x}_0$ を計算していけば固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$ が求められるわけである．しかし，$A^k\boldsymbol{x}_0$ の長さは，$|\lambda_1| > 1$ なら発散し，$|\lambda_1| < 1$ なら 0 に収束してしまうので，数値計算上都合がよくない．そこで，スケーリングを組み込んで，

$$\boldsymbol{y}_k = A\boldsymbol{x}_{k-1}, \quad \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{y}_k / \|\boldsymbol{y}_k\|_2 \tag{8}$$

と計算する．これが**べき乗法**である．$\boldsymbol{x}_k$ は，$\lambda_1 > 0$ ならば固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$（もしくは $-\boldsymbol{z}_1$）に収束し，$\lambda_1 < 0$ ならば，$(-1)^k\boldsymbol{x}_k$ が固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$（もしくは $-\boldsymbol{z}_1$）に収束する．しかし，一々このようなことを書いていると大変なので，以下，ベクトル列 $\boldsymbol{\xi}_k$ が各 k 毎に適当な符号をつけたとき，そのベクトル列がベクトル $\boldsymbol{\zeta}$ に収束するとき，$\boldsymbol{\xi}_k$ は $\boldsymbol{\zeta}$ に本質的に収束すると言うことにする*4)．$\boldsymbol{x}_k$ は固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$ に本質的に収束しているわけである．収束の速さ $\|\pm\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{z}_1\|_2$

*3) ここで，Gram–Schmidt の直交化法によって，行列の QR 分解が求めるられることが分かったわけであるが，Gram–Schmidt の直交化法が実際に QR 分解を求める際に用いられることは殆ど無い．丸め誤差の影響を受け易いためである．実際の計算にあたっては，Householder 変換や Givens 変換といった直交変換を用いた方法が用いられる[11]．なお，このようなことは本稿全体に言えることで，本稿では原理を説明するが，実際の計算は，この原理通りに行われるわけではなく，演算量，丸め誤差，メモリ等に注意を払った精緻な方法を用いて行われる．詳細は，数値計算の専門書を参照されたい．

*4) この「本質的に収束する」は一般に通用する用語ではないが，適切と思われるし，かつ便利なので用いる．

は，(7) より分かるように，$\mathrm{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k)$ である．

固有値は，素朴には $\boldsymbol{y}_k = A\boldsymbol{x}_{k-1}$ と $\boldsymbol{x}_{k-1}$ との成分比で計算できるが，対称行列に対しては **Rayleigh 商**

$$\rho(\boldsymbol{x}_{k-1}) = \frac{\boldsymbol{x}_{k-1}^{\top} A \boldsymbol{x}_{k-1}}{\boldsymbol{x}_{k-1}^{\top}\boldsymbol{x}_{k-1}} = \boldsymbol{y}_k^{\top}\boldsymbol{x}_{k-1} \qquad (9)$$

で計算するほうが成分比より良い近似を与える．実際，$\boldsymbol{x}$ が固有ベクトル $\boldsymbol{z}_i$（もしくは $-\boldsymbol{z}_i$）の近似となっている，すなわち，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon}$（もしくは $\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon}$）（$\boldsymbol{\varepsilon}$ は $\|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2$ が小さいベクトル）とすると，成分比の精度は $\mathrm{O}(\|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2)$ であるが，Rayleigh 商の場合，

$$\begin{aligned}\rho(\boldsymbol{x}) &= \frac{(\pm\boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon})^{\top} A (\pm\boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon})}{(\pm\boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon})^{\top}(\pm\boldsymbol{z}_i + \boldsymbol{\varepsilon})} \\ &= \frac{\lambda_i(1 \pm 2\boldsymbol{\varepsilon}^{\top}\boldsymbol{z}_i) + \boldsymbol{\varepsilon}^{\top} A \boldsymbol{\varepsilon}}{(1 \pm 2\boldsymbol{\varepsilon}^{\top}\boldsymbol{z}_i) + \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2} \\ &= \lambda_i + \mathrm{O}\big(\|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2\big) \qquad (10)\end{aligned}$$

であり，精度がよい．

例 1 行列

$$A = \begin{bmatrix} -2 & -1 & -1 \\ -1 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad (11)$$

に対するべき乗法 (8)（固有値は Rayleigh 商 (9) で計算する）を考える．行列 A の固有値は $\lambda_1 = -3$, $\lambda_2 = -2$, $\lambda_3 = 1$ であり，対応する固有ベクトルは，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{z}_1 &= (1/\sqrt{2},\ \ 1/\sqrt{2},\ \ \ 0\ \ )^{\top}, \\ \boldsymbol{z}_2 &= (1/\sqrt{3}, -1/\sqrt{3},\ \ 1/\sqrt{3}\,)^{\top}, \\ \boldsymbol{z}_3 &= (1/\sqrt{6}, -1/\sqrt{6}, -2/\sqrt{6}\,)^{\top}\end{aligned}$$

である．初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ を乱数を用いて与えて，実行した結果を表 1 に示す（倍精度で計算した結果を表示している）．ベクトル $\boldsymbol{x}_k$ が $\boldsymbol{z}_1$ に本質的に収束していること，および，ベクトルの収束の速さに比べて，Rayleigh 商 $\rho(\boldsymbol{x}_k)$ が速く収束しているのが見てとれる．

表 1 べき乗法 (8) を対称行列 (11) に適用した結果．

k	$\boldsymbol{x}_k^{\top}$	$\rho(\boldsymbol{x}_k)$
0	(0.847499, 0.160230, 0.506037)	−2.455012
1	(−0.927159, −0.259907, −0.269859)	−2.696431
2	(0.869694, 0.429401, 0.243408)	−2.842742
3	(−0.841451, −0.518046, −0.153588)	−2.923984
4	(0.801937, 0.587166, 0.110149)	−2.964789
5	(−0.774675, −0.628213, −0.072301)	−2.984045
⋮	⋮	⋮
∞	±(0.707107, 0.707107, 0)	−3

3.2 逆反復

べき乗法は優越固有値と対応する固有ベクトルを求める方法であったが，絶対値最小の固有値 λ_n と対応する固有ベクトルもべき乗法を応用して求めることができる．実際，$A\boldsymbol{z}_n = \lambda_n\boldsymbol{z}_n$ は $A^{-1}\boldsymbol{z}_n = (1/\lambda_n)\boldsymbol{z}_n$ と書き直せるから，逆数 $1/\lambda_n$ は，A^{-1} の固有値であり，しかも，優越固有値となる．したがって，A^{-1} にべき乗法を適用した計算

$$\boldsymbol{y}_k = A^{-1}\boldsymbol{x}_{k-1}, \quad \boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{y}_k/\|\boldsymbol{y}_k\|_2$$

によって $\boldsymbol{z}_n$ が求められる．これを**逆反復**または**逆べき乗法**という．固有ベクトルへの収束速度は $\mathrm{O}(|\lambda_n/\lambda_{n-1}|^k)$ である．固有値 λ_n は Rayleigh 商などによって求めることができる．

逆反復は，そのままでも用いられるが，実数 s を選んで $A - sI$ に対して逆反復を適用する形でよく用いられる．s は**シフト**とよばれ，この $A - sI$ に対する逆反復は**シフト付き逆反復**とよばれる．$A - sI$ の絶対値最小の固有値は，s に最も近い固有値 λ となるので，シフト付き逆反復で λ に対応する固有ベクトルが求められる．このときの収束速度は，s に 2 番目に近い固有値を λ' として，$\mathrm{O}((|\lambda - s|/|\lambda' - s|)^k)$ である．

ある固有値 λ の近似値が分かっているとき，それをシフト s に選ぶと，$|\lambda - s|/|\lambda' - s| \ll 1$ であるから，シフト付き逆反復によって λ に対応する固有ベクトルを高速に求めることができる．

さらに，近似固有ベクトルが与えられたとき Rayleigh 商 (9) が固有値の良い近似与えることに注目すると，Rayleigh 商をシフトに選んだシフト付き逆反復：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}_k &= (A - s_{k-1}I)^{-1}\boldsymbol{x}_{k-1}, \quad \boldsymbol{x}_k := \boldsymbol{y}_k/\|\boldsymbol{y}_k\|_2, \\ s_k &= \left(\frac{\boldsymbol{x}_k^{\top}A\boldsymbol{x}_k}{\boldsymbol{x}_k^{\top}\boldsymbol{x}_k} = \right)\boldsymbol{x}_k^{\top}A\boldsymbol{x}_k\end{aligned}$$

を自然に思いつく（k 毎にシフトが異なることになるが）．この反復法は **Rayleigh 商反復**とよばれ，極めて高い収束性をもつ*5)．

3.3 同時反復法

べき乗法では，1 本の初期ベクトルに行列 A のべき乗を掛けていくことを考えたが，ここでは，m 本の初

*5) 詳細は，対称行列の固有値問題に関するバイブルと言ってよい Parlett の教科書[9]を参照されたい．

期ベクトル $\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \boldsymbol{x}_2^{(0)}, \cdots, \boldsymbol{x}_m^{(0)}$ に A のべき乗を掛けていき，それを用いて，$\boldsymbol{z}_1$（優越固有値に対応する固有ベクトル）以外の固有ベクトルに関する情報も得ることを考えよう．

記法の節約のため，m 本の独立な $n\,(\geq m)$ 次元ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_m$ から，この順で，Gram–Schmidt の直交化法で正規直交ベクトル $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_m$ を作ることを

$$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_m\} \xrightarrow{\text{GS}} \{\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_m\}$$

と書くことにする．

まずは，簡単のために $m = 2$ とする．べき乗法のところで証明したように，$A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}$ は優越固有値に対する固有ベクトル $\boldsymbol{z}_1$ 方向に向いていく．一方，$A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)}$ は，(6) のように固有ベクトルで展開してみると，$\boldsymbol{z}_1$ 成分を引いたベクトルは，絶対値が 2 番目に大きい固有値の固有ベクトル $\boldsymbol{z}_2$ 方向に向いていくことがわかる．したがって，$A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)}$ から $A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}$ 方向の成分を引いたもの

$$A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)} - \frac{(A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)}, A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)})}{\|A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}\|_2^2} A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}$$

は $\boldsymbol{z}_2$ 方向に向かっていくことが期待される．実際，適当に $\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \boldsymbol{x}_2^{(0)}$ をとれば，通常，期待通りになることが証明される（証明は文献 11) を参照されたい．ここでは，直観的に理解されたい）．したがって，$A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}, A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)}$ に Gram–Schmidt の直交化法を適用して正規直交ベクトル $\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}$ を求めれば，$\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}$ は $\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2$ に本質的に収束する．ただし，べき乗法の場合のスケーリングに対応して，行列 A を掛ける毎に Gram–Schmidt の直交化を適用する形で計算を進める：

$$\begin{array}{ccc}
\{A\boldsymbol{x}_1^{(0)}, A\boldsymbol{x}_2^{(0)}\} & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_1^{(1)}, \boldsymbol{x}_2^{(1)}\} \\
& \swarrow & \\
\{A\boldsymbol{x}_1^{(1)}, A\boldsymbol{x}_2^{(1)}\} & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_1^{(2)}, \boldsymbol{x}_2^{(2)}\} \\
& \vdots & \\
\{A\boldsymbol{x}_1^{(k-1)}, A\boldsymbol{x}_2^{(k-1)}\} & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}\} \\
& \swarrow & \\
\{A\boldsymbol{x}_1^{(k)}, A\boldsymbol{x}_2^{(k)}\} & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_1^{(k+1)}, \boldsymbol{x}_2^{(k+1)}\}.
\end{array}$$

上記で計算された $\boldsymbol{x}_1^{(k+1)}, \boldsymbol{x}_2^{(k+1)}$ と

$$\{A^{k+1}\boldsymbol{x}_1^{(0)}, A^{k+1}\boldsymbol{x}_2^{(0)}\} \xrightarrow{\text{GS}} \{\tilde{\boldsymbol{x}}_1^{(k+1)}, \tilde{\boldsymbol{x}}_2^{(k+1)}\}$$

として計算された $\tilde{\boldsymbol{x}}_1^{(k+1)}, \tilde{\boldsymbol{x}}_2^{(k+1)}$ とが一致することを確かめておこう．数学的帰納法による．$\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}$ と $\tilde{\boldsymbol{x}}_1^{(k)}, \tilde{\boldsymbol{x}}_2^{(k)}$ の一致を仮定する．仮定より $\{A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}, A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)}\} \xrightarrow{\text{GS}} \{\boldsymbol{x}_1^{(k)}, \boldsymbol{x}_2^{(k)}\}$ であるから，$\boldsymbol{x}_1^{(k)} = \alpha A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}$, $\boldsymbol{x}_2^{(k)} = \beta A^k\boldsymbol{x}_2^{(0)} + \gamma A^k\boldsymbol{x}_1^{(0)}$ と書ける．ここで，$\alpha, \beta > 0$ である．したがって，

$$\begin{aligned}
&\{A\boldsymbol{x}_1^{(k)}, A\boldsymbol{x}_2^{(k)}\} \\
&= \{\alpha A^{k+1}\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \beta A^{k+1}\boldsymbol{x}_2^{(0)} + \gamma A^{k+1}\boldsymbol{x}_1^{(0)}\}
\end{aligned}$$

であり，左辺に Gram–Schmidt の直交化を適用した結果は $\boldsymbol{x}_1^{(k+1)}, \boldsymbol{x}_2^{(k+1)}$，右辺の結果は $\tilde{\boldsymbol{x}}_1^{(k+1)}, \tilde{\boldsymbol{x}}_2^{(k+1)}$ であるから，両者は一致する．

一般の m に対しては，m 本の初期ベクトル $\{\boldsymbol{x}_i^{(0)}\}_{i=1}^m$ を選び，それに行列 A を掛ける毎に Gram–Schmidt の直交化を適用する：

$$\begin{array}{ccc}
\{A\boldsymbol{x}_i^{(0)}\}_{i=1}^m & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_i^{(1)}\}_{i=1}^m \\
& \swarrow & \\
\{A\boldsymbol{x}_i^{(1)}\}_{i=1}^m & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_i^{(2)}\}_{i=1}^m \\
& \vdots & \\
\{A\boldsymbol{x}_i^{(k-1)}\}_{i=1}^m & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^m \\
& \swarrow & \\
\{A\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^m & \xrightarrow{\text{GS}} & \{\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}\}_{i=1}^m.
\end{array}$$

この $\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^m$ は固有ベクトル $\{\boldsymbol{z}_i\}_{i=1}^m$ に本質的に収束する．この算法は**同時反復法**とよばれている．固有値は Rayleigh 商 $\rho(\boldsymbol{x}_i^{(k)})$ で求める．

べき乗法に逆反復があったように，A^{-1} に対する同時反復法もあり，**同時逆反復法**とよばれる．$\boldsymbol{z}_n, \boldsymbol{z}_{n-1}, \cdots, \boldsymbol{z}_{n-m+1}$ が求められる．また，$(A - sI)^{-1}$ に同時反復法を適用した**シフト付き同時逆反復法**もある．s に最も近い固有値に対応する固有ベクトルから，m 番目に近い固有値に対応する固有ベクトルまでが求められる．

例 2　例 1 の行列に $m = 2$ の同時反復法を適用する．初期ベクトル $\boldsymbol{x}_1^{(0)}$ は例 1 と同じとし，$\boldsymbol{x}_2^{(0)}$ は，乱数でベクトルを生成し，$\boldsymbol{x}_1^{(0)}$ と直交するようにした．$\boldsymbol{x}_1^{(k)}$ は例 1 で与えた結果と同じであるから，$\boldsymbol{x}_2^{(k)}$ のみを表 2 に示した．ベクトル $\boldsymbol{x}_2^{(k)}$ がゆっくりではあるが固有ベクトル $\boldsymbol{z}_2$ に本質的に収束し，Rayleigh 商 $\rho(\boldsymbol{x}_2^{(k)})$ が固有値 -2 に収束しているのが見てとれる．

3.4 QR 法

同時反復法で $m = n$ の場合を考える．この場合の計算

$$\{A\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n \xrightarrow{\text{GS}} \{\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}\}_{i=1}^n$$

表 2　同時反復法を対称行列 (11) に適用した結果.

k	$(\boldsymbol{x}_2^{(k)})^\top$	$\rho(\boldsymbol{x}_2^{(k)})$
0	$(-0.457876,\ 0.702939,\ 0.544267)$	0.499757
1	$(-0.188859, -0.297860,\ 0.935741)$	-0.565277
2	$(-0.407812,\ 0.902918, -0.135752)$	-1.582570
3	$(\ 0.264469, -0.642734,\ 0.718992)$	-1.930679
4	$(-0.476015,\ 0.739438, -0.476068)$	-2.000028
5	$(\ 0.460985, -0.639293,\ 0.615465)$	-2.007362
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
∞	$\pm(0.577350, -0.577350,\ 0.577350)$	-2

を行列を用いて表現する．まず，2 節で述べたように，n 本のベクトルに Gram–Schmidt の直交化を適用することは，n 本のベクトルを並べてできる行列の QR 分解であることに注意すると，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n$ を並べてできる直交行列を X_k，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k+1)}\}_{i=1}^n$ のそれを X_{k+1} と書くとき，上記の計算は

$$AX_k = X_{k+1}R_k \quad (AX_k \text{を QR 分解する}) \tag{12}$$

と表現することができる．さらに，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n$ は $\{\boldsymbol{z}_i\}_{i=1}^n$ に本質的に収束するので，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n$ を基底とした A の表現

$$A_k = {X_k}^\top AX_k \; (= {X_k}^\top X_{k+1}R_k) \tag{13}$$

は固有値を対角成分にもつ対角行列 $\mathrm{diag}\,(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ に収束する．A_{k+1} を A_k から計算することを考えよう．A_{k+1} は，(12) より $X_{k+1}^\top A = R_k X_k^\top$ が成り立つことに注意すると

$$A_{k+1} = {X_{k+1}}^\top AX_{k+1} = R_k X_k^\top X_{k+1} \tag{14}$$

と書ける．ここで，(13), (14) を睨んで

$$Q_k = {X_k}^\top X_{k+1} \tag{15}$$

とおくと，X_k と X_{k+1} がともに直交行列だから Q_k も直交行列であり，(13), (14) は

$$A_k = Q_k R_k, \quad A_{k+1} = R_k Q_k \tag{16}$$

と表現できることが分かる．これは，まさに，QR 法である．初期値 A_0（すなわち X_0）は，行列 A のもつ構造を有効利用するために，$A_0 = A$（すなわち $X_0 = I$）ととる．

以上で示したことを標語的に表すと，結局

QR 法 ＝ 同時反復法

＋ 近似固有ベクトル系での $\boldsymbol{A}$ の表現 (17)

となる．QR 法がそんなに不思議なものでないことを納得いただけたであろうか．

例 3　例 1 の行列 (11) に QR 法を適用する．A_k（対称行列であるので，対角成分から下の成分のみ表示してある）が固有値を対角成分にもつ対角行列に収束しているのが見てとれる．

$$A_1 = \begin{bmatrix} -2.666667 & * & * \\ -0.577350 & -2 & * \\ -0.471405 & 0.816497 & 0.666667 \end{bmatrix},$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} -2.869565 & * & * \\ -0.353948 & -2.039526 & * \\ -0.177822 & 0.482537 & 0.909091 \end{bmatrix},$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} -2.943005 & * & * \\ -0.234674 & -2.033739 & * \\ -0.062096 & 0.255677 & 0.976744 \end{bmatrix},$$

$$A_4 = \begin{bmatrix} -2.974450 & * & * \\ -0.158260 & -2.019702 & * \\ -0.021089 & 0.130633 & 0.994152 \end{bmatrix},$$

$$A_5 = \begin{bmatrix} -2.988549 & * & * \\ -0.106474 & -2.009987 & * \\ -0.007085 & 0.065879 & 0.998536 \end{bmatrix},$$

$$\vdots$$

$$A_\infty = \begin{bmatrix} -3 & * & * \\ 0 & -2 & * \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

実は，QR 法は別の解釈，

QR 法 ＝ 同時逆反復法

＋ 近似固有ベクトル系での $\boldsymbol{A}$ の表現 (18)

ももっている．もっとも，これは QR 法というよりは，$m = n$ の場合に同時反復法がもっている性質：

$$\text{同時反復法} = \text{同時逆反復法} \tag{19}$$

によるものである．この性質を示そう．同時反復法を表現した式 (12) において，転置をとり，さらに逆をとると

$$A^{-1}X_k = X_{k+1}R_k^{-\top} \tag{20}$$

を得る（A の対称性を用いている．一般の A に対しては $A^{-\top}X_k = X_{k+1}R_k^{-\top}$ となる）．$R_k^{-\top}$ は，下三角行列（対角成分より上の成分が 0 の行列）であること

に注目すると，この行列演算は同時逆反復法：

$$\{A^{-1}\boldsymbol{x}_n^{(k)}, A^{-1}\boldsymbol{x}_{n-1}^{(k)}, \cdots, A^{-1}\boldsymbol{x}_1^{(k)}\}$$
$$\xrightarrow{\text{GS}} \{\boldsymbol{x}_n^{(k+1)}, \boldsymbol{x}_{n-1}^{(k+1)}, \cdots, \boldsymbol{x}_1^{(k+1)}\}$$

に他ならないことが分かる．とくに，$\boldsymbol{x}_n^{(k)}$ は，$\boldsymbol{x}_n^{(0)}$ を初期ベクトルとする逆反復法で得られるベクトル列である．

逆反復法ということであれば，シフトを導入することは自然である．(20) に代わって，シフト付き同時逆反復法は

$$(A - sI)^{-1}X_k = X_{k+1}R_k^{-\top}$$

となる．このとき，$A_k = X_k{}^{\top}AX_k$，$A_{k+1} = X_{k+1}{}^{\top}AX_{k+1}$ は，Q_k を (15) で定義すると，

$$A_k - sI = Q_kR_k, \quad A_{k+1} = R_kQ_k + sI$$

と計算される．これは**シフト付き QR 法**とよばれる．なお，行列 A_k の (n, n)-成分 $a_{nn}^{(k)}$ は定義によって，$\boldsymbol{x}_n^{(k)}$ の Rayleigh 商 $(\boldsymbol{x}_n^{(k)})^{\top}A\boldsymbol{x}_n^{(k)}$ であるから，シフト付き QR 法において $a_{nn}^{(k)}$ をシフトに用いると $\boldsymbol{x}_n^{(k)}$ は Rayleigh 商反復で得られたベクトル列となる．その意味で，シフト付き QR 法は Rayleigh 商反復を自然な形で内包し得るアルゴリズムであると言える．

4. べき乗法から QR 法へ (非対称行列の場合)

行列 A は正則かつ非対称とし，簡単のため，固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, n)$ は実で絶対値がすべて異なるとし，番号は対称行列の場合と同じように，つまり (5) のようにつける．そして，それぞれの固有値に対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_n$ とする．行列表現すれば，$\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_n$ を並べてできる行列を Z とし，固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ を対角に並べた対角行列を Λ とすると $A = Z\Lambda Z^{-1}$ となる．

対称行列の場合，QR 法のコア部分である同時反復法では，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n$ は固有ベクトル列 $\{\boldsymbol{z}_i\}_{i=1}^n$ に本質的に収束したが，非対称の場合は固有ベクトル列に収束することは期待できない．しかし，$\{\boldsymbol{z}_i\}_{i=1}^n$ に Gram–Schmidt の直交化を適用してできる正規直交ベクトル系 $\{\boldsymbol{q}_i\}_{i=1}^n$ に本質的に収束するであろうことは予想がつくであろう（紙数の都合で例をのせられないのが残念である）．そして，実際そうであることが証明される[11]．

正規直交ベクトル系 $\{\boldsymbol{q}_i\}_{i=1}^n$ を並べてできる行列 Q を用いて，状況を行列表現してみよう．$\{\boldsymbol{q}_i\}_{i=1}^n$ の Gram–Schmidt の直交化は Z の QR 分解 $Z = QR$ に対応し，このとき，A は

$$A = Z\Lambda Z^{-1} = Q(R\Lambda R^{-1})Q^{\top} = QSQ^{\top}$$

と表現できる．S は $S = R\Lambda R^{-1}$ であり，固有値が対角に並ぶ上三角行列である．一般に，実行列 A の直交行列 Q と上三角行列 S を用いた上記のような分解を**実 Schur 分解**といい，Q の列ベクトルは **Schur ベクトル**とよばれる[*6)]．この用語を用いれば，同時反復法では，$\{\boldsymbol{x}_i^{(k)}\}_{i=1}^n$ は Schur ベクトル列 $\{\boldsymbol{q}_i\}_{i=1}^n$ に本質的に収束するということができる．行列表現では，各 k に対して適当に決まる対角成分が $+1$ または -1 の対角行列を D_k で表すとき，$X_kD_k \to Q$ となる．そしてこのとき，$A_k = X_k{}^{\top}AX_k$ は

$$\begin{aligned} A_k &= X_k{}^{\top}AX_k \\ &= D_kD_kX_k^{\top}Q(R\Lambda R^{-1})Q^{\top}X_kD_kD_k \\ &\to D_kR\Lambda R^{-1}D_k \quad (k \to \infty) \end{aligned}$$

と振る舞うことが分かる．つまり，対角成分は固有値に収束し，対角成分から下の成分は 0 に収束し，対角成分から上の成分は本質的に収束していく．

対称行列の場合の QR 法の理解 (17) に対応して，非対称行列の場合は，

QR 法 ＝ 同時反復法

＋ 近似 Schur ベクトル系での A の表現

ということができる．同時逆反復法としての解釈も可能であるが，X_k に関する反復は $X_k^{\top}A^{-1} = R_k^{-1}X_{k+1}^{\top}$ と書けるので，行列に左からベクトルを掛ける形での同時逆反復法であり，

QR 法 ＝ 同時逆反復法（左 Schur ベクトル用）

＋ 近似左 Schur ベクトル系での A の表現

ということができる．

5. おわりに

最後，駆け足になってしまったが，QR 法の原理の説明，ご理解いただけたであろうか．説明が直観的であったので，理論的に確りとした説明が欲しいという方には，手前味噌で恐縮であるが，拙著[11] などをご覧

*6) 実 Schur 分解の詳細に関しては文献 7) を参照せよ．

いただければ幸いである．なお，数値例から分かるように，QR 法（基本形）の収束は非常に遅い．実際の QR 法は，様々な工夫の上に高速化を実現し，実用になっているものである．それらの工夫に関しては，文献 10)，もしくは，古くなるが Francis による論文[4]や文献 12) を参照されたい．

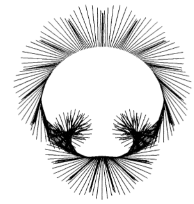
最後に，数値計算等，お手伝い頂いた東京大学大学院情報理工学系研究科の相島健助博士に感謝の意を表します．

参考文献

1) Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe and H.A. van der Vorst: *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*, SIAM (2000).
2) J. Dongarra and F. Sullivan: The Top 10 Algorithms, *Computing in Science and Engineering*, Vol.**2** (2000), No.1.
3) J.G.F. Francis: The QR Transformation: A Unitary Analogue to the LR Transformation—Part I *The Computer Journal*, Vol.**4** (1961), pp.265–271.
4) J.G.F. Francis: The QR Transformation—Part II, *The Computer Journal*, Vol.**4** (1962), pp.332–345.
5) M.H. Gutknecht and B.N. Parlett: From qd to LR, or, How were the qd and LR algorithms discovered? *IMA Journal of Numerical Analysis*, doi:10.1093/imanum/drq003（まだ，紙に印刷される前の電子版）．なお，http://www.sam.math.ethz.ch/~mhg/talks/qdLRlongHO.pdf に，論文と同じ内容の講演スライドがある．
6) P. Henrici: *Applied and Computational Complex Analysis, Vol.I*, John Wiley and Sons, 1974.
7) 池辺八洲彦，池辺淑子，浅井信吉，宮崎佳典：『現代線形代数—分解定理を中心として—』，共立出版 (2009).
8) V.N. Kublanovskaya: On Some Algorithms for the Solution of the Complete Eigenvalue Problem, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, Vol.**3** (1961), pp.637–657.（本文では参照する機会がなかったが，QR 法を Francis と同時期に提案した論文．ただし，原理を与えた論文で，Francis の論文のような実装の工夫—非常に重要である—についての記述はない．）
9) B.N. Parlett: *The Symmetric Eigenvalue Problem*, Prentice-Hall (1980); SIAM (1998).
10) G.W. Stewart: *Matrix Algorithms, Vol.II: Eigensystems*, SIAM (2001).
11) 杉原正顯，室田一雄：『線形計算の数理』，岩波書店 (2009).
12) 戸川隼人：『マトリクスの数値計算』，オーム社 (1971).
13) J.H. Wilkinson: *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press (1965); Clarendon Press (1988).（本文では参照する機会がなかったが，この分野のバイブルである．）

（すぎはら・まさあき，東京大学大学院情報理工学系研究科）

数値計算と相対性理論



米田　元

1. Introduction

この記事は，**数値計算**と**相対性理論**の関係を解説するのが目的である．ただ，この本の特集のテーマが数値計算であるから，数値計算そのものについての解説は他の記事に譲り，相対性理論の簡単な紹介と，相対性理論で数値計算が活躍する場とその様子を解説したいと思う．他の方程式（流体の方程式や電磁気の方程式）を数値計算によって解く場合との違い（相対性理論ならではの特徴）が分かるように工夫した．

また，読者が学部学生から研究者まで幅広いことを意識して，前半の 2 節：概論と，後半の 3 節：**数値相対論**[1,2]に分けた．2 節では相対性理論に関する知識がない読者も想定し，詳細な式の説明などなしに相対性理論での数値計算の様子を図を豊富に用いて紹介した．3 節では，アインシュタイン方程式を数値シミュレーションする場合に，必要なことなどについて説明した．

2. 概論

本来の音速は，その伝達媒体に対するものであり，媒体に対して動きながら観測すると正確な音速が測れなくなる．これに対し，光速はどのような速さで動いても常に一定の値を得る，という実験結果がある．これを光速度不変の原理と呼んで，指導原理にした特殊相対性理論を，1905 年にアインシュタインが発表した．時間と空間を分けて考えずに，それらが混在した時空が舞台となっているという特徴がある．

さらにアインシュタインが 1915 年に完成した一般相対性理論は，重力の理論である．4 年後には一般相対性理論誕生 100 年を迎えることになる．計量という物差しが，物質分布に応じて変化し，時空に歪み（曲率）が生じる．物質分布と時空の曲率の関係を微分方程式として表したものが，**アインシュタイン方程式**である．また，歪んだ時空の中で，力を受けていない粒子や光の運動を記述したものが**測地線の方程式**である．つまり，図 1 のように，ニュートン重力において重力ポテンシャルの役割を果たしていたものが，一般相対性理論では計量に置き換わったのである．

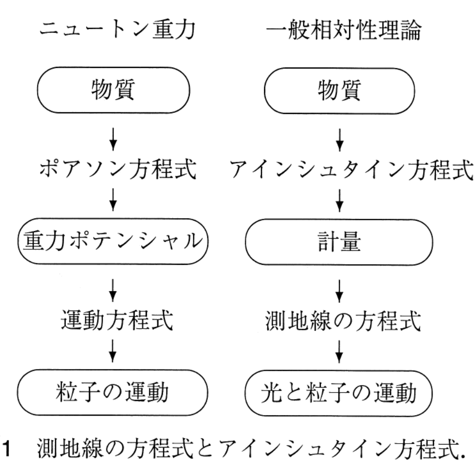


図 1　測地線の方程式とアインシュタイン方程式.

厳密解を得るのが難しい微分方程式が登場したとき，様々な対称性を課すなどする簡単化や，近似解を得ようとする方法が多く用いられるが，それらも不可能なときには数値シミュレーションによってその解の様子を知ろうというのが，数値計算の大きな役割であろう．相対性理論の中で，そのような場面に出会うのは，主に，上で述べた測地線の方程式とアインシュタイン方程式である．

2.1 測地線の方程式のシミュレーション

与えられた計量の下で，質点や光の時空軌跡を求める指導原理が，測地線の方程式である．

$$\frac{d^2x^\mu}{ds^2}+\Gamma^\mu_{\nu\rho}\frac{dx^\nu}{ds}\frac{dx^\rho}{ds}=0.$$

ただし $\mu,\nu,\rho=0,1,2,3$*1) である．時空上の曲線を表す $x^\mu(s)$ が，4個の未知関数で，1変数関数である．$\Gamma^\mu_{\nu\rho}$ は接続と呼ばれ，計量 $g_{\mu\nu}$ の1階微分である（詳しくは3節に）．つまり，測地線の方程式は関数が4個で，変数が1つの2階常微分方程式である．これにより，ブラックホールや恒星の周辺の質点や光の軌道を知ることができる．星の作る球対称重力場であるシュワルツシルド時空において，質点の軌道を数値計算した例が図2である．ニュートン力学（ケプラーの法則）によれば，楕円軌道になるはずであるが，図のように，周回を重ねるごとに楕円の傾きが少しずつずれる．実際に太陽の周りを回る水星は，このように楕円からのずれが観測される（水星の近日点移動という）．これは，アインシュタイン自身が，近似計算によって示している．この説明の成功が，一般相対性理論を世に広めた要因である．しかしこの近似計算は，重力が弱いこと（星からの距離が比較的遠いこと），楕円の離心率が小さいこと（円軌道に近いこと）がベースになっており，そうでない場合は近似によって求めた軌道と，測地線の方程式によって求めた軌道の差が大きくなってくる．

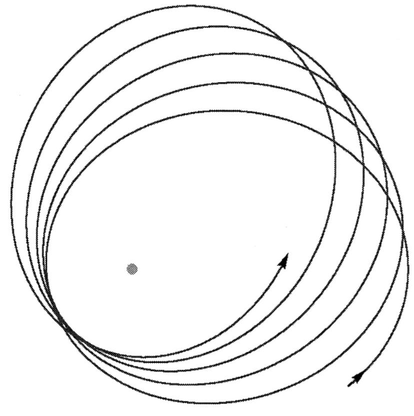


図2 シュワルツシルド時空内の質点の軌道．中央付近にあるのが恒星で，周り書いてあるのが衛星の軌道．

*1) 以下ギリシャ文字の添字は 0,1,2,3 を動くものとする．また，第2項では $\sum_{\nu=0}^{3}\sum_{\rho=0}^{3}$ が省略されている．アインシュタインの規約と呼ばれ，以下ではこれを使う．

2.2 アインシュタイン方程式のシミュレーション

物質分布と曲率（計量の歪み）の釣り合いの様子を記述したものがアインシュタイン方程式である．

$$R_{\mu\nu}-\frac{1}{2}R\,g_{\mu\nu}+\Lambda\,g_{\mu\nu}=\kappa\,T_{\mu\nu} \qquad (1)$$

（詳しくは3節に）．簡単のため，物質分布 $T_{\mu\nu}$ は与えられているものと仮定すると，これは2階対称テンソル計量 $g_{\mu\nu}$ が未知関数で10個あり，変数が時空座標 (t,x,y,z) の4つの2階非線形偏微分方程式であり，かなり難しい．時空に対称性を課し，アインシュタイン方程式を簡単化することで厳密解が得られることはある．例えば前述のシュワルツシルド時空は，球対称で静的なアインシュタイン方程式の解である．ただ，一般的に，特に動的な解を机上で知るのは極めて困難である．このような場合でもアインシュタイン方程式の解を知りたいときに，武器になるのが数値計算である．

アインシュタイン方程式は，計量が平坦時空のそれに近いという意味の近似をすると，波動方程式になる．ここから発生が予想される波を**重力波**という．重力波の発生は，アインシュタイン自身が予見しているが，実はまだその発生は観測されていない．

電荷をもった物質が加速度運動すると電磁波が発生するように，質点が加速度運動すると重力波が発生する．例えば，手を振っただけでも重力波は発生するが，あまりにも微細で，観測は難しい．図3のように重いダンベルが回転すれば，より強

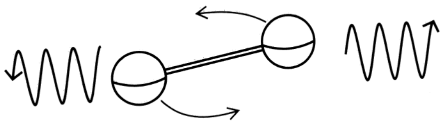


図 3　ダンベルの回転と重力波.

い重力波が出る．観測できるほどの重力波の波源としては，重い連星がダンベルとなって，加速度運動する必要があり，連星中性子星，連星ブラックホールなどがその候補と考えられている．

重力波の放出によって，連星は少しずつエネルギーを失っていくため，次第に近づき，回転数が上がり，最後には合体する．このとき，強い重力波を放出する．

ハルスとテイラー[3]は連星中性子星の重力波放射によるエネルギー放出について，アインシュタイン方程式から導かれる近似の理論値と，観測による連星の動きから算出される値が一致することをつきとめた．これは間接的な重力波の観測と評価され，1993 年にノーベル賞を受賞した．

では直接的な観測はどうすればいいかというと，数値計算によって得たアインシュタイン方程式の解の波形と，後述のような観測実験で得たデータを比較するのである．

図 4 は，数値計算の結果の例である．連星ブラックホールが定常的に互いに回り続けるところから，合体して 1 つになるところまでのシミュレーションである．合体寸前に強い重力波が出ているところが見てとれると思う[4,5]．

観測実験のほうも少し解説しておく．図 5 のように左の光源から発射したレーザー光が，2 つの経路を通り，鏡で反射されて検出される．このときできる干渉の様子を調べる．このとき，重力波があると 2 経路の長さが微妙に変化するので，干渉の結果も変化する．これにより重力波を検出する．

米国の LIGO，日本の国立天文台三鷹キャンパス内にある TAMA300 などが稼働中であるが，重力波の検出に成功したという報告は残念ながらまだない．連星の合体など重力波源となる出来事の発生にもよるので，運次第のところもある．日本では岐阜県神岡町に LCGT（Large-scale Cryogenic

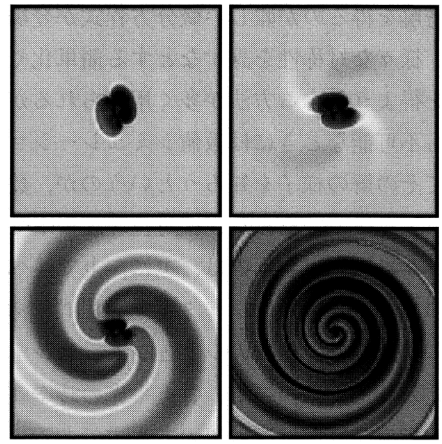


図 4　ブラックホール合体のシミュレーションの様子[4]．

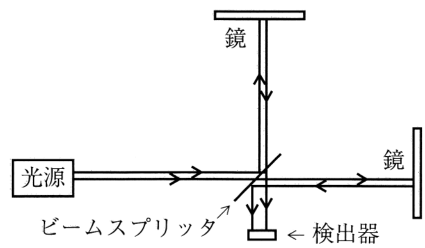


図 5　マイケルソン・モーリー型のレーザー干渉計.

Gravitational wave Telescope，大型低温重力波望遠鏡）という，さらに強力な重力波観測施設が計画されている．

このような観測と，数値計算によるアインシュタイン方程式のシミュレーションが，重力波検出の両輪となっているのである．重力波検出の目的は，単に一般相対性理論の検証という意味だけではない．**重力波天文学**と呼ばれ，近未来の宇宙観測の望遠鏡となる．昔は可視光天文学（可視光による望遠鏡による宇宙観測）のみであったが，観測技術の進化と共に電波天文学，X 線天文学，ニュートリノ天文学などの強力な望遠鏡による天文学が出現した．重力波天文学は，重力波による望遠鏡で，宇宙をより遠くまで見ようとするものである．

また，アインシュタイン方程式をシミュレーションすることの目的は，重力波の検出だけではない．重力崩壊をシミュレーションしブラックホールのできる様子を調べたり，宇宙全体の膨張をシミュ

レーションすることもできる．宇宙の様々な現象が，コンピュータ上で再現できるわけで，数値計算すべき対象は限りなくある．

3. 数値相対論

2節では，アインシュタイン方程式を数値的に解く動機や，その結果を概説した．実際にアインシュタイン方程式のシミュレーションを行うには，様々な準備，手順が必要である．この3節では，それについて解説する．

3.1 一般相対性理論

計量 $g_{\mu\nu}$ から，接続係数 $\Gamma^{\mu}_{\nu\rho}$，リーマン曲率テンソル $R^{\mu}{}_{\nu\rho\sigma}$，リッチテンソル $R_{\mu\nu}$，スカラー曲率 R は次のように定義される．これらと，測地線の方程式は，一般相対性理論というよりは，リーマン幾何学である．

$$\Gamma^{\mu}_{\nu\rho} := \frac{1}{2} g^{\mu\sigma} \left(\partial_\nu g_{\rho\sigma} + \partial_\rho g_{\nu\sigma} - \partial_\sigma g_{\nu\rho} \right),$$

$$R^{\mu}{}_{\nu\rho\sigma} := \partial_\rho \Gamma^{\mu}_{\sigma\nu} - \partial_\nu \Gamma^{\mu}_{\rho\sigma} + \Gamma^{\mu}_{\rho\delta} \Gamma^{\delta}_{\sigma\nu} - \Gamma^{\mu}_{\nu\delta} \Gamma^{\delta}_{\rho\sigma},$$

$$R_{\mu\nu} := R^{\rho}{}_{\mu\rho\nu}, \quad R := R_{\mu\nu} g^{\mu\nu}.$$

ただし ∂ は偏微分作用素である．これらに，宇宙定数 Λ，エネルギーモーメントテンソル $T_{\mu\nu}$，重力定数 κ を加えて，アインシュタイン方程式 (1) の各項ができる．

3.2 3+1 分解

アインシュタイン方程式 (1) は，$\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ という添字の可動範囲からも分かる通り，時間1次元と空間3次元が混在した形式である．相対性理論としては，このように時空が混在した形こそが，時空座標変換に対して共変的で望ましいのであるが，シミュレーションする場合は，時間と空間に分解する必要がある．それは，時間一定面上で現在の計量の状況を初期値として表し，それを時間発展させて，未来の計量の様子を知る，という形が多いからである．

まず**計量の 3+1 分解**を次式で行う．

$$ds^2 = -\alpha^2 dt^2 + \gamma_{ij} (dx^i + \beta^i dt)(dx^j + \beta^j dt).$$

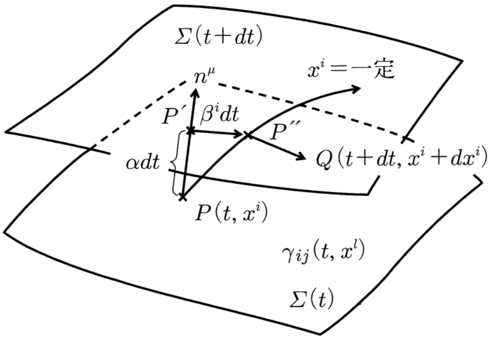


図6　時空の 3+1 分解[1)]．

ただし $i, j = 1, 2, 3$[*2)] である．これは，関数の数としては，$g_{\mu\nu}$ の10個が，ラプス α の1つ，シフト β^i の3つ，空間計量 γ_{ij} の6つに分解されただけである．

このラプス関数 α とシフトベクトル β^i は，図6のように，時間 $= t$ の曲面 $\Sigma(t)$ と，時間 $= t + dt$ の曲面 $\Sigma(t+dt)$ の位置関係を表している．$\Sigma(t)$ の単位法線ベクトルは $n_\mu = (-\alpha, 0, 0, 0)$ と表せる．これを使って，**エネルギーモーメントテンソルの 3+1 分解**も次のように行う．

$$T_{\mu\nu} = \rho n_\mu n_\nu + J_\mu n_\nu + J_\nu n_\mu + S_{\mu\nu}.$$

これと同様に**アインシュタイン方程式の 3+1 分解**を行うと，**束縛条件**と呼ばれる

$$R^{(3)} + K^2 - K_{ij} K^{ij} - 2\Lambda - 16\pi G\rho = 0, \quad (2)$$

$$D_j K^j{}_i - D_i K - 8\pi G J_i = 0 \quad (3)$$

と，**発展方程式**と呼ばれる

$$\partial_t \gamma_{ij} = -2\alpha K_{ij} + D_i \beta_j + D_j \beta_i, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \partial_t K_{ij} = {} & \alpha R^{(3)}_{ij} + \alpha K K_{ij} - 2\alpha K_{ik} K^k{}_j - D_i D_j \alpha \\ & + (D_i \beta^k) K_{kj} + (D_j \beta^k) K_{ki} + \beta^k D_k K_{ij} \\ & - \alpha \Lambda \gamma_{ij} - 8\pi G\alpha \left(S_{ij} + \frac{1}{2} \gamma_{ij} (\rho - S^k_k) \right) \quad (5) \end{aligned}$$

になる．ただし D は空間的共変微分作用素，$R^{(3)}$ は空間的曲率とする．ここで K_{ij} は外部曲率と呼

*2) 以下ラテン文字は 1,2,3 を動くものとする．第2項ではアインシュタインの規約により $\sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3}$ が省略されている．

ばれるもので，(4) がその定義式である．これらの式を ADM 形式という．

3.3 シミュレーションの手順

3+1 分解されたアインシュタイン方程式 (2)–(5) は，初期面 $t=0$ で満たされるべき，初期条件 (2), (3) と，時間発展に用いられる (4), (5) に分けられる．つまり，数値計算としては**束縛条件つき時間発展**と分類される（図 7）．

初期値の構成：まず初期面 $\Sigma(0)$ でのデータを構成する．具体的には束縛条件 (2), (3) を現実的な境界条件の下に解くという作業である．束縛条件は大雑把に言うと楕円型方程式であり，反復法が使われることが多い．有限要素法を使うこともある．

ゲージ条件の設定：ラプス α，シフト β^i を設定する．これらがどんなものであるべきかは，アインシュタイン方程式には記述がない．言い方を変えれば，何でも良い．ただし，座標特異点が発生しないように注意する必要がある．また，時空に特異点がある場合は，特異点を回避するように工夫が必要である．ラプスとシフトのことをゲージと呼ぶことがあるので，これらの条件をゲージ条件と呼ぶ（図 8）．また時空をスライスする仕方を決めていくことになるので，スライス条件とも呼ばれる．

計量の時間発展：$\Sigma(t)$ 上の γ_{ij} と K_{ij} のデータを，$\Sigma(t+dt)$ にデータを移行する．具体的には時間発展方程式 (4), (5) を差分化して解く．クランク・ニコルソン法などのスキームが用いられることが多い．

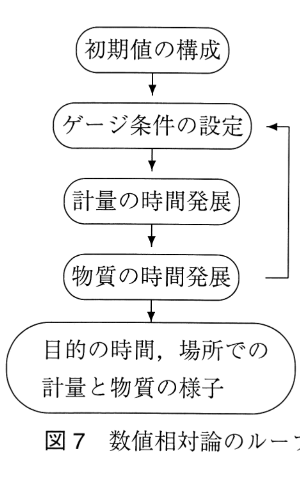


図 7　数値相対論のループ．

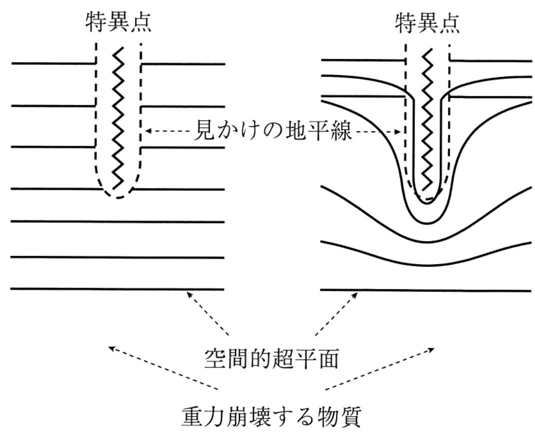


図 8　特異点を避けるためのゲージ条件[2)]．

物質の時間発展：更新された計量をもとに，物質分布 $T_{\mu\nu}$ のでデータも，$\Sigma(t)$ から $\Sigma(t+dt)$ に移行する．具体的には流体の方程式

$$\nabla_\nu T^{\mu\nu}=0$$

を解く．∇ は 4 次元共変微分作用素である．この式はエネルギー保存則と運動量保存則を表しており，アインシュタイン方程式 (1) から導かれる．

ゲージ条件の設定，計量の時間発展，物質の時間発展のメインループを，必要な回数だけ行う．そのとき，時間発展方程式に従えば，束縛条件は保存されるので，初期に解いておくだけでよい．式の上ではそうなのだが，実際には束縛条件は随時，成り立っているかどうかをモニターする必要がある．

3.4 定式化問題

発展方程式は発展のたびに課すが，束縛条件は初期に解くだけである．そのため，束縛条件は数値計算上の積算的なエラーがたまりやすい．実際に，強い重力場や，長時間の発展においては，束縛条件の破れが顕著になり，真の解から離れていってしまったり，計算不可能になってしまうことが多い．アインシュタイン方程式のシミュレーションでは，特にこれが起きないような工夫が必要である．

アインシュタイン方程式 (1) を 3+1 分解し，束縛条件と時間発展方程式 (2)–(5) に書き換える方法（定式化）は一意的ではない．別の言い方をすると，(2)–(5) と必要十分なように，束縛条件と時間発展方程式を書きなおしても，アインシュタイン方程式を解いていることには変わりがない．ただ，どのように束縛条件と時間発展方程式を構成したかによって，数値シミュレーションの安定性が変わってくる．よって，どのように定式化すれば良いかを検討する必要がある．これを**数値相対論の定式化問題**[6]という．

定式化の試みで有名なものに，BSSN 形式[7]や GH 形式[8]などがある．ADM 形式よりも数値計算する上で安定性が高いことが知られている．

ここでは，より簡単な束縛条件による発展方程式の補正について説明する．一般的に発展方程式

$$\partial_t u^i = f(u^i, \partial_j u^i, \cdots)$$

に対して，束縛条件 $C^a(u^a, \partial_j u^a, \cdots) = 0$ が課されているとする．このとき，束縛条件 C^a の時間微分が求められるが，

$$\partial_t C^a = g(C^a, \partial_i C^a, \cdots) \qquad (6)$$

というように，右辺が C^a あるいはその空間微分の和になっていれば，束縛条件は保存される．この式を Constraint Propagation という．ここで，

$$\partial_t u^i = f(u^i, \partial_j u^i, \cdots) + F(C^a, \partial_j C^a, \cdots) \quad (7)$$

というように，発展方程式の右辺を C^a あるいはその空間微分がかかるように補正しても，束縛条件と発展方程式の全体としては，必要十分に保たれ，同じ解を持つ．この補正によって数値計算での安定性がどの変化するのかを事前に評価したい．この評価の一つの方法として，Constraint Propagation の固有値解析という方法がある．この補正 (7) によって，(6) も

$$\partial_t C^a = g(C^a, \partial_i C^a, \cdots) + G(C^a, \partial_i C^a, \cdots).$$

というように変化する．この右辺は，やはり C^a あるいはその空間微分の和になっているので，フーリエ変換を施すことによって $\partial_t \tilde{C}^a = M^a{}_b \tilde{C}^b$ という形で書くことができる．この時の係数行列 $M^a{}_b$ の固有値を調べ，その実部が負であれば，束縛条件は減衰し，安定性が高くなる．しかし，行列 $M^a{}_b$ にはダイナミカルな u^i が含まれており，一般に符号を判定するのは，困難である．そこで，数値計算のベースとなっている背景時空の計量を $M^a{}_b$ に代入し，固有値とその符号を求めることで，近似的な安定性を調べることができる．

この固有値解析により，ある程度の安定性は得られることができるが，計量が背景時空から離れていにつれ，近似が悪くなる．そのため，背景時空に依存しないような評価ができる補正が望ましいところである．

$$\partial_t u^i = f(u^i, \partial_j u^i, \cdots) - \kappa^{ij}\left(\frac{\delta}{\delta u^j}\int C_a C^a d^3x\right)$$

という形[9]の補正が背景によらず評価でき，より長時間の安定性を持つことを実証している．

参考文献

1) 中村卓史，大橋正健，三尾典克，『重力波をとらえる—存在の証明から検出へ』，京都大学学術出版会．
2) 柴田大，『一般相対論の世界を探る 重力波と数値相対論』，東京大学出版会，2007.
3) R.A. Hulse, J.H. Taylor, *Astrophysical Journal Letters*, vol.**195**, L51–L53 (1975).
4) F. Pretorius, http://jp.arxiv.org/abs/0710.1338.
5) M. Shibata, K. Taniguchi, K. Uryu, *Phys. Rev. D* **71** (2005) 084021.
6) 真貝寿明，米田元，応用数理 VOL.**15** NO.1 (2005).
7) M. Shibata and T. Nakamura, *Phys. Rev. D* **52**, 5428 (1995); T.W. BaumAgarte and S.L. Shapiro, *Phys. Rev. D* **59**, 024007 (1998).
8) F. Pretorius, *Class. Quant. Grav.* **22**, 425 (2005); D. Garfinkle, *Phys. Rev. D* **65**, 044029 (2002).
9) T. Tsuchiya, G. Yoneda, and H. Shinkai, *Phys. Rev. D* **83**, 064032 (2011); D.R. Fiske, *Phys. Rev. D* **69**, 047501 (2004).

（よねだ・げん，早稲田大学理工学術院）

シュレーディンガー方程式から物性へ



塚田　捷

1. はじめに

物質の普遍的な構成粒子である**電子**の発見と，電子の振舞いを支配する奇妙な力学―**量子力学**の構築こそは，20世紀の初頭における現代物理学の誕生を告げるランドマークであった．今日では，物質の構造やそのあらゆる性質は，量子力学に従う電子の振舞いによって理解できる．例えば，電子の振舞いによって原子間に働く力が導かれ，この力から安定な物質構造が定まる．また，なぜある物質は電気を通し，磁石となり，またどのような色をしているかなど，物質の示す様々な性質は基本的には電子の振舞いから詳細に説明できる．また，物質どうしが互いに接近するとき，どのような変化や化学反応が起こるかも，究極的には電子の振舞いが支配している．

ドブロイは真空における粒子の直線運動と，平面波であるその物質波の**2重性**を見出したが，シュレーディンガーはこれをさらに発展させて，原子など現実の物質内で電子の新しい属性である物質波の従う方程式を提案した[1)]．すなわち，シュレーディンガーの**波動力学**によれば電子の振舞いはその**波動関数** ψ から定まるが，定常状態ではこれを決定する基本方程式は次のように表される：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \qquad (1)$$

これは（時間に依存しない）**シュレーディンガー方程式**と呼ばれる．

ここで (1) 式左辺のカッコ内はハミルトニアンという演算子（$H = -\hbar^2\Delta/2m + V(\boldsymbol{r})$）であるが，その第1項は，電子の**運動エネルギー**に対応し，第2項は**ポテンシャルエネルギー**に対応する．右辺の E は電子の全エネルギーで，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ が空間の有限な領域に局在しているならば，$V(\boldsymbol{r})$ によって定まる離散固有値の一つである．一方，電子が遠方から飛来して散乱中心と相互作用して，また遠方へ飛び去る散乱問題では，エネルギー E は遠方の領域で電子のもつ運動エネルギーであり，その値は自由に決められる．一方，結晶内では，ポテンシャルは任意の格子ベクトル $\boldsymbol{R}$ について，$V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = V(\boldsymbol{r})$ という並進対称性をもつ．この場合，波動関数は結晶と同じ並進対称性をもつ関数 $u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$（$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$）によって $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\,u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ と表されるので，シュレーディンガー方程式は全空間で解く必要はなく，結晶の単位胞の中でのみ解けばよい．このときエネルギー固有値は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の連続関数，$E = E(\boldsymbol{k})$ となるが，これをエネルギーバンドと呼ぶ[2)]．与えられた $V(\boldsymbol{r})$ と解としての波動関数の性質により，(1) 式を解くための数値計算法は様々であるが，与えられた外場 $V(\boldsymbol{r})$ の中での1個の電子の波動関数は，計算機を使えば数値的に求めることができる．

2. 密度汎関数法とその数値計算法

前節では，外場の中に 1 個の電子が存在する場合のシュレーディンガー方程式について述べたが，物質内の電子系を記述するには，互いに相互作用する多数の電子の状態を求めなければならない．この多体問題を厳密に解くことは不可能であるが，実用的には非常に良い近似解を与える方法として，**密度汎関数法（DFT 法）**がある[3)]．この方法は，1960 年代に，Hohenberg と Kohn が不均一電子ガスにおける基本定理を提出し[4)]，Kohn と Sham[5)] が基本となる電子の 1 粒子波動関数を解くシュレーディンガー方程式を提示したものである．この Hohenberg–Kohn–Sham の方法は，今日では密度汎関数法（DFT 法）あるいは第一原理法と呼ばれ，物質の電子状態を求める基本的な方法となっているが[3)]，以下ではその導出は省いて，結論としての処方箋を述べよう．

DFT 法では，物質内の個々の電子は原子核と，それ自身以外の電子との相互作用で生じる実効的な平均場ポテンシャル $V_{eff}(\boldsymbol{r})$

$$V_{eff}(\boldsymbol{r}) = v(\boldsymbol{r}) + \int \frac{e^2 \rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} d\boldsymbol{r}' + \frac{d}{d\rho}(\rho \varepsilon_{XC}(\rho))\bigg|_{\rho=\rho(\boldsymbol{r})} \tag{2}$$

の中を運動する 1 個の粒子として振る舞うものとする．電子の波動関数は，(1) 式の外場 $V(\boldsymbol{r})$ として $V_{eff}(\boldsymbol{r})$ を用いるシュレーディンガー方程式によって求められるが，これを **Kohn–Sham 方程式**と呼んでいる．ただし，(2) 式において，$v(\boldsymbol{r})$ は原子核によるポテンシャル，$\rho(\boldsymbol{r})$ は以下で与えられる電子の密度分布；

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_{i=1}^{N} |\psi_i(\boldsymbol{r})|^2 \quad (N \text{ は全電子数}). \tag{3}$$

$\varepsilon_{XC}(\rho)$ は密度 ρ の一様な電子系の電子 1 個当たりの交換･相関エネルギーである．すなわち，DFT 法の処方箋は Kohn–Sham 方程式，すなわち (1) 式で $V \to V_{eff}$ としたもの，および (2) 式，(3) 式とを連立させて，逐次近似法によって自己無撞着に波動関数 $\{\psi_i\}$ を数値計算することである．

実際に Kohn–Sham 方程式を数値的に解くために，よく用いられるのは波動関数を平面波，または原子軌道関数などの基底関数 $\{\phi_i\}_{i=1,2,\cdots,M}$ の線形結合によって $\psi = \sum_{i=1}^{M} c_i \phi_i$ と展開する方法である．変分法によって各基底に対する展開係数 $\{c_i\}_{i=1,2,\cdots,M}$ は，永年方程式

$$\sum_{j=1}^{M} H_{ij} c_j = E \sum_{j=1}^{M} S_{ij} c_j, \qquad H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle, \quad S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \tag{4}$$

の固有ベクトルとして得られる[*1)]．ただし，ハミルトニアン H は (1) 式のカッコの部分である．大規模系では非常に大きな行列の対角化計算をする必要があるが，最近における計算機の長足の進歩はこのような大規模数値計算を可能としている．ここに述べたのは最も標準的な基底関数による展開法を用いるシュレーディンガー方程式，あるいは Kohn–Sham 方程式の解法であるが，その他にも種々の解法があり，問題によって使い分けられている．例えば，実空間を細かなメッシュに分解して，**有限要素法**によって波動関数を求める方法なども有力な方法である[6)]．

このようにして Kohn–Sham 方程式の固有関数と固有値とが求められれば，(3) 式に従って電子分布 $\rho(\boldsymbol{r})$ が得られるので，これからさらに電子系の全エネルギーが計算できる．このような計算は，経験的なパラメータを一切使うことなしに，系の構造や物性を議論できることから**第一原理法**とも呼ばれる．ここに述べた DFT 法による計算は，原子，分子，固体，表面を含め，多様な物質の構造や性質を高い精度で記述できるために，現在では物質科学，材料科学から，分子科学，タンパクなどの生命科学にいたるまで，基本的な電子の振舞いから量子力学に基づいて物質研究を行う理論手法として確立するに至っている．

---

*1） $\langle \phi_i | H | \phi_j \rangle = \int \phi_i^*(\boldsymbol{r}) H \phi_j(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}$,
$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \int \phi_i^*(\boldsymbol{r}) \phi_j(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}$
である．

しかし，より詳しく述べると，基本型のDFT法では十分な記述ができない問題や系が存在する．例えばHohenberg–Kohnの定理は，基底状態の全エネルギーや電子密度についてはDFT法により算出できることを保証するものの，励起状態については保証していない．これと関係してKohn–Sham方程式の固有値は，正確には電子の準粒子としての励起スペクトルを与えるものではなく，したがって半導体などのバンドギャップを正しく再現できない．また，電子間の多体相関が大きい強相関系物質の電子状態の記述も十分ではなく[7]，閉殻分子間のファンデアワールス力も再現できない[8]．これらの基本型のDFT法の種々の弱点を補強するため，いろいろな方法論が，最近，精力的に研究されている．次の節では，平衡系における基底状態の計算とは異なる，ナノ構造で典型的に見られる非平衡開放系へとKohn–Sham方程式を適用した例を紹介しよう[9]．

3. 第一原理リカージョン伝達行列法

2つの電極間に挟まれた原子細線や分子架橋などの「ナノ接合系」は，最近のナノ物質の典型であり，その構造や電子・スピン・熱などの輸送特性に興味が集まっている．このような性質も基本的にはKohn–Sham方程式の解から求められるが，系が閉じておらず，また平衡状態にないことから，前節に述べた基本形のDFT法は適用できない．また，はるかなトンネル領域における波動関数の小さい裾を精密に計算する必要が生じるために，基底関数の線形結合による展開は有効でなく，波動関数を散乱状態からトンネル領域まで一貫して高精度に記述できる計算法が求められる．Kohn–Sham方程式からこうした計算を可能とする方法として，筆者らの開発した第一原理リカージョン伝達行列法があるが，本節ではこれについて解説しよう[10]．

この方法では，電子の波動関数は散乱波として解くので，その入射エネルギー E は確定した値に定めておく．電極表面に沿う $\boldsymbol{r}_{\parallel}$ 方向には周期的な超格子モデルを仮定して，

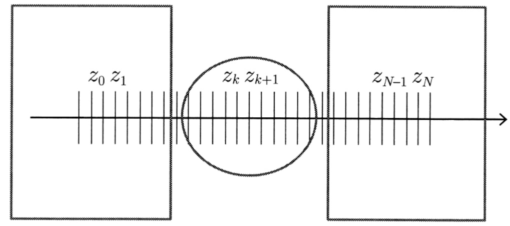


図1 第一原理リカージョン伝達行列法を適用するナノ架橋系の概念図．z 軸方向は電極表面に垂直で，電流方向に平行である．

$$\Psi_i(\boldsymbol{r}) = \exp\left(i\boldsymbol{k}_{\parallel}\cdot\boldsymbol{r}_{\parallel}\right)\sum_j \exp\left(i\boldsymbol{G}_{\parallel}^j\cdot\boldsymbol{r}_{\parallel}\right)U_{ij}(z) \tag{5}$$

のように，波動関数の2次元平面波による展開を行う．ここで $\boldsymbol{k}_{\parallel}$ と $\boldsymbol{G}_{\parallel}^j$ とは，電極表面に沿う方向での波数ベクトルと逆格子ベクトルである．$U_{ij}(z)$ は，電極表面に垂直な z 軸座標に関する未知関数であるが，これを要素とする行列 $U(z)$ を伝達行列と呼ぶ．Kohn–Sham方程式は2階の線形微分方程式なので，運動エネルギーに対応するラプラシアンの項 $\left(-\hbar^2\Delta/2m\right)$ を差分で近似すると，伝達行列に関する次の3項の差分行列方程式が得られる：

$$U(z_{k+1}) - K(z_k)U(z_k) + U(z_{k-1}) = 0. \tag{6}$$

ただし $\{z_k\}_{k=\cdots,-1,0,1,2,\cdots}$ は，等間隔に配置する z 軸上のメッシュ点（図1参照），$K(z)$ は実効ポテンシャル $V_{eff}(\boldsymbol{r})$ の2次元フーリエ変換から決定される行列である．ここで，$R_k = U(z_k)U^{-1}(z_{k-1})$ で定義される伝達行列の比行列を導入すると，

$$R_k = \left[K(z_k) - R_{k+1}\right]^{-1} \tag{7}$$

というリカージョン関係が成り立つ．ところで，入射波が左電極側にあり，右電極には透過してゆく波だけがある「左電極波」については，左右の電極の十分内部での散乱波の漸近解が

$$U(z_p) = \begin{cases} \left(K_L^{+}\right)^p \Lambda + \left(K_L^{-}\right)^p R & (p \le 0), \\ \left(K_R^{+}\right)^p T & (N \le p) \end{cases} \tag{8}$$

表1 リカージョン伝達行列法で計算したポテンシャル障壁 $1/\cosh^2(z)$ についての透過係数.

Energy	Exact	$h=1.0$	$h=0.5$	$h=0.2$	WKB
0.2	0.012413383	0.012472732	0.012417504	0.012413383	0.007358269
0.4	0.062986591	0.063653976	0.063035725	0.062987932	0.038162036
0.6	0.192860287	0.194673260	0.193006772	0.192864218	0.134945913
0.8	0.409617734	0.411489872	0.409833778	0.409657631	0.391372587
1.0	0.639483981	0.639971053	0.639558977	0.639485784	1.000000000

と書ける．ここで $p=0$ の座標点 z_0，および $p=N$ の座標点 z_N は，それぞれ左電極と右電極の内側に選ぶものとする．この境界条件によって各メッシュ点での比行列 $\{R_k\}_{k=0,1,2,\cdots,N}$ と反射係数からなる行列 R，透過係数よりなる行列 T とを決定することができる．ただし，(8) 式における行列 K_L^+, K_L^-, K_R^+ は，それぞれ左電極からの入射波，左電極への反射波，右電極への透過波に対応する伝達行列で，無限に大きい電極物質の波動関数から簡単に求められる．比行列が求められると，伝達行列は，右端 z_N のものから順に比行列を乗ずることによって次々と求められ，結果として (5) 式の波動関数が決定される．同様に，右電極から入射する場合の波動関数（右電極波）も決定できる．

この計算法の重要な特徴は，右電極と左電極とが平衡状態にない場合，したがって両者のフェルミ準位（E_F^L と E_F^R）が異なる場合の解が求められることである．実際，現実に電流を流す状況では両電極のフェルミ準位が食い違い，その差は電極間のバイアス電圧を V，電子電荷を e として $E_F^R - E_F^L = eV$ で与えられる．架橋部の実効ポテンシャル V_{eff} を決定するには，そこでの電子密度分布が必要であるが，これは左電極波についてはバンドの底から E_F^L まで，右電極波については E_F^R までの状態が電子に占有されているとして計算する．このようにして決定される実効ポテンシャルと右および左電極波を計算するときのポテンシャルが一致するまで，逐次近似法による計算を繰り返すことによって最終的な結果が得られる．

このリカージョン伝達行列法の特長は，トンネル領域から弾道的な領域に至るまで，一貫した方法で高精度に波動関数を計算できることである．原子軌道の線形結合を用いるLCAO法では，原子の中心から遠い位置での波動関数を正確には求められない．さらにリカージョン法によらず伝達行列を計算する場合には，多くの場合，その発散的な振舞いのために解を求められないが，上に述べた法では比行列のリカージョン関係を用いることで，トンネル領域を含めて発散の困難を除去した計算が可能となる．

例えば表1は，リカージョン伝達行列法で計算した $V(z)=1/\cosh^2(z)$ というポテンシャル障壁の透過係数を，種々の入射エネルギーと色々なメッシュ幅 h について示す．このポテンシャルについての厳密解による透過係数と，教科書でよく知られるWKB法[11]による透過係数も比較のために示した．この表からリカージョン伝達行列法による計算結果は，比較的メッシュが大きい場合でも近似解をよく再現するが，メッシュ幅が小さくなるにつれその精度が極めてよくなっていることがわる．一方，WKB近似は定量的には，精度がそれほど良くないことがわかる．

図2は，リカージョン伝達行列法の計算例として，アルミニュームの探針とシリコン表面（図2(a)参照）の間に流れるトンネル電流分布をいくつかの探針・試料間距離について示した[10]．バイアス電圧としては，2Vを設定した．また，図2(b)には探針側のフェルミ準位より上でのポテンシャル分布も示した．探針の高さが12auのときには，探針の前面にはトンネル障壁が存在し，このため探針・試料間の電流はトンネル過程によって流れる．計算結果では，トンネル電流は探針頂点原子の比較的近傍に集中しているが，これは走査トンネル

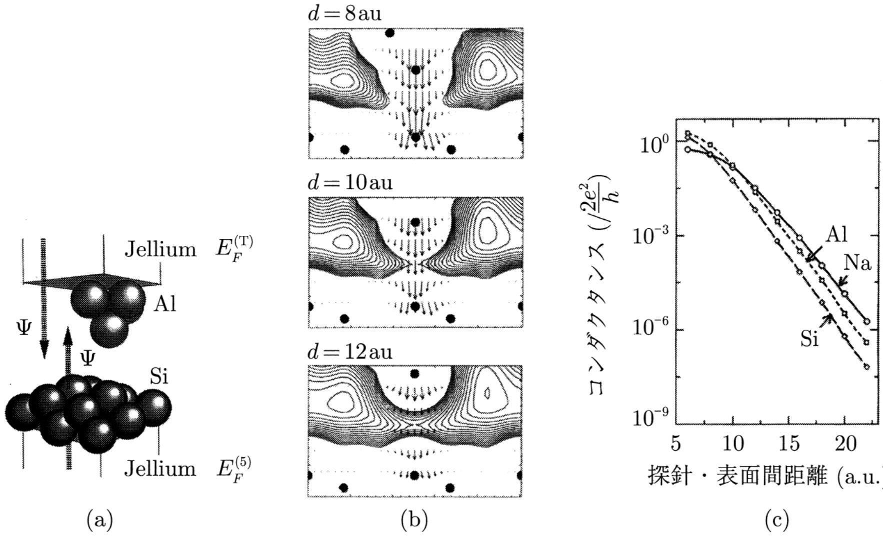


図 2　(a) Si(111) 試料表面と Al の STM 探針の模型．(b) 第一原理リカージョン伝達行列法で計算した電流分布とポテンシャル障壁．バイアス電圧は試料側に 2V 印加している．(c) トンネルコンダクタンスの探針・表面間距離依存性．探針が Al の場合の他に，Si, Na の場合も示してある．

顕微鏡においてなぜ原子的な分解能が実現されるかを説明している．

探針の高さがさらに減少するにつれ，探針頂点付近のポテンシャル障壁は狭く低くなり，10au のときには障壁に小さな穴が開き始め，8au になるとそれがさらに拡大する．このとき電子はこの孔の中を弾道的に流れるが，その様子が図 2 (b) からわかる．探針・試料間の電流をコンダクタンスの値としてプロットしたのが，図 2 (c) である．探針の高さが大きく，十分な障壁がある場合には，トンネル電流は探針高さとともに指数関数的に増大すること，探針高さが減少して障壁に孔があき始めるとトンネル電流の距離に対する指数関数的な振舞いは飽和する傾向をみせ，5au 前後ではほぼ一定値に近づくことがわかる．このときのコンダクタンスの値は，いわゆる量子化コンダクタンスの単位で 1 に近い数値であり，後で述べるような伝導の量子的流路である固有チャンネルが，およそ 1 個分開いていることを意味する．図 2 のような計算結果は，バイアスが印加された 2 つの電極物質が極めて接近するとき，その間の電流がトンネル領域から原子点接触領域へと，どのように移り変わるかを詳細に明らかにしたものである．このような計算は，トンネル領域からチャンネル領域まで一貫して高精度に扱うことのできる第一原理リカージョン伝達行列法によってはじめて可能となった．

ところで，上に述べた固有チャンネルとは互いに直交する独立な電子の量子的流路のことで，これを入射波の初期状態にとれば，(8) 式における透過係数行列 T についての正方行列 $T^{+}T$ は対角行列になる[12]．すなわち，任意の初期状態の表示から固有チャンネルを決定するには，リカージョン伝達行列法で副産物として得られる行列 $T^{+}T$ を対角化する表示へとユニタリー変換すればよい．このとき各固有チャンネルに対応する $T^{+}T$ の対角要素は，そのチャンネルの電子の透過確率であり，これに量子化コンダクタンス単位 $2e^2/h$ $(= 1/12.9\,\mathrm{k\Omega})$ を乗じると，そのチャンネルから生じるコンダクタンスの値が得られる．接合系全体としてのコンダクタンスは，これら各チャンネルからのコンダクタンスを総和して得られる．このような固有チャンネル解析によって，原子細線における量子化コンダクタンスの解明やその定量的な解析も可能と

なる．

4. まとめと展望

これまでの各節で述べたように，物質の基本構造と諸物性を解析・予測するためには，量子力学に基づいて電子の波動関数を計算することが必要である．波動関数はシュレーディンガー方程式から決められるが，現実の物質内では互いに相互作用する多数電子の状態を求める必要がある．これを一個の電子の問題へと簡単化させる方法が第一原理密度汎関数法（DFT 法）であり，その波動関数を決めるものがKohn–Sham 方程式である．Kohn–Sham 方程式に含まれる実効ポテンシャルは，電子密度分布から求められるために，占有波動関数から決められる電子分布が実効ポテンシャルを決めた電子分布と一致するように，自己無撞着な計算が必要である．このような計算を実行するには，行列の対角化などの大規模計算が必要とされるが，そのための計算技術にも多くの発展があり，次世代スパコンの導入など計算機の著しい進歩もこのような分野の発展に貢献している．

ところで，平衡系における閉じた系の電子状態のみならず，非平衡開放系の電子状態を求めることも，最近のナノスケール物質科学では必要となっている．こうした方面の研究の一例として，トンネル領域から弾道的な領域まで一貫して高精度に波動関数やコンダクタンスの計算を可能とするKohn–Sham 方程式の新しい解法である第一原理リカージョン伝達行列法について紹介した．

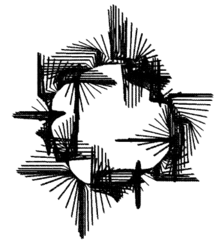
現在では，電子相関が特に強くない物質については，ここで紹介したDFT 法が極めて実効的な方法であることが物質科学の広範な分野で認識され，またその有効性を発揮している．ただし，通常の対角化法では基底関数の総数の3乗に比例する計算規模になり，現実的なサイズの系の計算は不可能に近い．この観点からは，オーダー N の計算手法が重要であり，そのための計算法も考案されつつある．その他，通常の密度汎関数法の限界とそれを乗り越える試みについて多くの展開があるが，本稿ではそれらについては触れなかった．それらについては，他の文献を参照していただきたい．

参考文献

1) 朝永振一郎『量子力学 I, II』みすず書房．
2) 塚田捷『物性物理学』裳華房 2007.
3) J. Callaway and N.H. March, *Solid State Physics*, Vol.**38**, Academic Press, p135 (1984).
4) P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, **136 B**, (1964) 864.
5) W. Kohn and L.S. Sham, *Phys. Rev.* **140A**, (1965) 1133.
6) E. Tsuchida and M. Tsukada, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **67** (1998) 3844.
7) 藤原毅夫『固体電子構造—物質設計の基礎』，朝倉書店 (1999).
8) M. Dion, H. Rydberg, E. SchrÅNoder, D.C. Langreth, and B.I. Lundqvist, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 246401 (2004).
9) K. Hirose and M. Tsukada, *Phys. Rev. B***51** (1995) 5278.
10) N. Kobayashi, K. Hirose and M. Tsukada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **35** (1996) 3710.
11) 小谷正雄『量子力学 I』岩波全書 129（岩波書店, 1951）.
12) N. Kobayashi, M. Brandbyge, and M. Tsukada, *Phys. Rev. B***62** (2000) 8430.

（つかだ・まさる，東北大学原子分子材料科学高等研究機構）

エラーフリー変換がもたらす数値計算の新たな方向性



荻田　武史

1. はじめに

数値計算とは，解析的に解くのが難しい問題を数値的に解く計算やその手法のことである．現実世界の現象を解析したい場合に現れる微分方程式や積分の問題などは，ほとんどが解析的な手法だけでは太刀打ちできないくらい複雑である．そのため，すべてを解析的に解くのは諦めることにして，計算機を使ってそれらしい答えを数値的に求めるわけである．

しかしながら，この「それらしい答え」というのが実はかなり厄介である．なぜなら，解析的な計算と違い，数値計算では様々な誤差が発生しているからである．したがって，最終的に得られた解（これを**数値解**と呼ぶ）がどれくらい正しいかを判定するのは非常に難しいわけだが，これについて真正面から立ち向かおうというのが精度保証付き数値計算である．詳しくは，専門書[4,6]や研究論文[2]，解説記事[5]を参考にして頂きたい．

さて，数値計算では，アルゴリズムの実装において**浮動小数点数**と**浮動小数点演算**を用いるのが普通である．浮動小数点演算とは，簡単に言えば，有限桁の計算のことである．すなわち，何かの計算をする度に決められた桁数以下の部分は丸められる（このとき生じる誤差を**丸め誤差**と呼ぶ）．このため，計算は高速になされるが，その反面，計算を重ねると次第に丸め誤差が蓄積していく．

この丸め誤差の蓄積を低減する代表的な方法として，多倍長精度演算がある．これは，大まかに言えば，ソフトウェア的な処理によって有効桁数 p を任意に大きくする方法である．しかし，ハードウェア的な処理によって高速に実行できる通常の浮動小数点演算に比べると非常に低速であることと，解くべき問題の多くは，事前に p をどれくらい大きくとれば最終的に意味のある数値解が得られるのか分からない，という問題点がある．

これに対し，**エラーフリー変換**（EFT: Error-Free Transformation）[3]は，できる限り通常の浮動小数点演算を用いて，計算途中で生じる丸め誤差の情報を保存しながら，最終的に意味のある（結果精度の高い）数値解を求めるための方法である．

以下では，このEFTによって，どのように数値計算の品質が向上するのかの一端を説明したい．

2. エラーフリー変換（EFT）

2進 p 桁の浮動小数点数全体の集合を $\mathbb{F}$ とする．実数体 $\mathbb{R}$ 上の演算 $\circ \in \{+, -, \times, \div\}$ に対応する浮動小数点演算を $\circledcirc$ と表す．また，$\mathit{fl} : \mathbb{R} \to \mathbb{F}$ を，$r \in \mathbb{R}$ を最も近い $f \in \mathbb{F}$ に丸める写像とする（これを，$\mathit{fl}(r) = f$ と書く）．浮動小数点演算の規格として普及している IEEE 754[1]に従う計算環境では，$a, b \in \mathbb{F}$ に対し下記が成り立つ：

$$x := a \circledcirc b = \mathit{fl}(a \circ b) \in \mathbb{F}.$$

このとき，$u := 2^{-p}$ を浮動小数点演算の相対精度（unit roundoff）とすると，x の誤差は

$$y := (a \circ b) - x, \quad |y| \le u|x|$$

である．直感的には，p（桁数）が大きいほど，$|y|$ は $|x|$ に比べて小さくなることを意味する．

残念ながら，$\mathbb{F}$ は環の構造を持たない．すなわち，$a \circ b \neq a \circledcirc b$ の場合があるため，必ずしも $a \circ b \in \mathbb{F}$ とはならないし，結合法則や分配法則も成立しない．しかしながら，$\circ \in \{+, -, \times\}$ であれば，一部の例外を除き，$y \in \mathbb{F}$ であるという性質がある．このとき

$$a \circ b = x + y, \quad \circ \in \{+, -, \times\}$$

のような変換を，浮動小数点演算のエラーフリー変換（EFT）と呼ぶ．つまり，この式の両辺は等号で結ばれており，左辺は誤差無しで右辺に変換されているのである．実際に y を求める方法は，Knuth や Dekker が示しているが，詳しくは文献 3) を参照されたい．

例として，加算の EFT を実現するアルゴリズム TwoSum とそのイメージ（図 1）を示す．

$$\begin{aligned} &function\ [x, y] := \texttt{TwoSum}(a, b) \\ &x := a \oplus b \\ &c := x \ominus a \\ &y := (a \ominus (x \ominus c)) \oplus (b \ominus c) \end{aligned}$$

ここで，TwoSum は，$a, b \in \mathbb{F}$ を入力すると $a+b = x+y$, $|y| \le u|x|$ を満たすような $x, y \in \mathbb{F}$ を出力する関数と考えればよい．本来，丸め誤差として失われるはずの y の情報を保存できるわけである．

これを拡張し，総和についての EFT を導くことができる．つまり，$v_i \in \mathbb{F}, 1 \le i \le n$ について

$$\begin{aligned} &s_1 := v_1 \\ &[s_i, w_{i-1}] := \texttt{TwoSum}(s_{i-1}, v_i),\ i = 2, \ldots, n \\ &w_n := s_n \end{aligned}$$

のようなアルゴリズムを考えると

$$s := \sum_{i=1}^{n} v_i = \sum_{i=1}^{n} w_i$$

が成り立つ（読者にも是非確認頂きたい）．すなわち，v から w への変換において，求めたい総和 s の情報は保存されているのである．

ここで，$w_n\ (= s_n)$ は s の近似値であり，w_i, $1 \le i \le n-1$ は加算における誤差の集まりである．このとき重要なのは，$v^{(0)} := v$, $v^{(1)} := w$ と考え，この変換を $v^{(k)}$, $k = 2, 3, \ldots$ と繰り返すと，$|v_n^{(k)}|$ の精度が十分に良くなるまで，誤差限界 $\sum_{i=1}^{n-1} |v_i^{(k)}|$ を単調に減少させることができることである．最終的には，ある $K \ge 1$ が存在して，$|v_n^{(K)}| \ge u^{-1}|v_{n-1}^{(K)}| \ge u^{-2}|v_{n-2}^{(K)}| \ge \cdots \ge u^{n-1}|v_1^{(K)}|$ を満たす $v^{(K)}$ に収束する．詳細については，我々の研究論文[3)]を参照頂きたい．

ベクトルの内積についても，乗算の EFT を用いると総和の問題に帰着するため，内積についての EFT も同様に導くことができる．これによって，数値線形代数の基礎となる行列ベクトル積や行列積についても応用可能となり，その結果として，数値計算全体の品質を向上させることができるわけである．

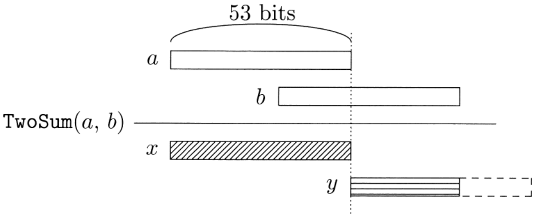


図 1　加算の EFT（$p = 53$, $|a| > |b|$ の場合）．

参考文献

1) ANSI/IEEE Std 754-2008: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, 2008.
2) M.T. Nakao, S. Oishi (eds.): Special Issue on State of the Art in Self-Validating Numerical Computations, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol.**26**, No.2–3 (2009).
3) T. Ogita, S.M. Rump, S. Oishi: Accurate Sum and Dot Product, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol.**26**, Issue 6 (2005), 1955–1988.
4) 大石進一：『精度保証付き数値計算』，コロナ社 (2000).
5) 数学セミナー，特集：計算の品質—精度・誤差・効率，2008 年 11 月号（通巻 566 号）.
6) 田端正久，中尾充宏：『偏微分方程式から数値シミュレーションへ／計算の信頼性評価』，講談社 (2008).

（おぎた・たけし，東京女子大学現代教養学部）

多彩に進化した数値計算

大石　進一（聞き手：編集部）

1. 数値計算のいま

——今回の特集テーマである“数値計算”は言葉だけを聞くと，具体的な数値を出して，それをデータとして使う，というような工学的なイメージが強いものでした．ところが，近年では数値計算の手法が数学や物理の理論の証明にも使われているといったことを聞きます．具体的にはどのような状況なのでしょうか．近年の動向も含めてお聞かせ願います．

もともと現代数値計算はフォン・ノイマンやチューリングによって本格的に最初の研究が行われました．二人ともコンピュータの定義や設計から始めて，フォン・ノイマンはフォン・ノイマン方式を，チューリングはチューリング・マシンの概念をそれぞれつくりました．そして，二人ともコンピュータを利用した数値計算の理論を考えています．



大石進一氏．

結論を言うと，数値計算というのは難しくて，誤差もたくさん入るものだということを，二人とも1940年代から50年代にかけて大論文で書いています．そういう意味で，最初から天才たちが，数値計算の理論は難しいものだ，と明言してしまっているという出発点が数値解析にはあります．

例えば，フォン・ノイマンはナヴィエ・ストークスの方程式を使って天気予報をやりたかったようです．彼は天才で暗算も速く計算も得意でしたから，ナヴィエ・ストークス方程式を解くのは手計算でやりたいと思っていたようです．

しかし，その天才をしても手で解くということは困難であったことから，計算機による数値計算をやろうということになったのです．そういう意味で，数学的な難問を解くための計算機がほしい，という要請で計算機の発明に至ったわけです．

その後，数値計算の理論については，ウィルキンソンが後退誤差解析という，得られた数値解を真の解としてもつ方程式を導出して，その方程式がどれだけ元の方程式と違っているかを見るという方法を開発しました．これは理論として成功し

ました．

後退誤差解析では，結果の誤差はわからないのですが，数値解を真の解とする方程式が元の方程式からあまり変形してなければ数値解を求めるアルゴリズムは安定であると考えられ，安定なアルゴリズムをつくるのが計算機のプロたちの目標になっていきました．

ウィルキンソンは，アルゴリズムの理論と同時にプログラムまでつくるということを推奨しました．それが1950年代から時代が進むにつれて蓄積されてパッケージ化されていきました．

こうして見ると，フォン・ノイマンたちは結果の誤差を知りたかったわけですが，それが難しいという経緯から，ウィルキンソンによって後退誤差解析という解析法が生まれ，それによって数値アルゴリズムの安定性がわかるようになり，数値計算の理論体系ができあがったと言えます．

数学者は，そうした後退誤差解析の中で安定なアルゴリズムを設計する，という所で活躍したのですが，それは結果の誤差ではないため，数値計算を数学的命題の証明には応用できなかったのです．こうしてウィルキンソン流の後退誤差解析が数値解析世界の主流を占めていきますが，数値計算は数学的命題の証明には使えないという風に信じられていくことにもなりました．

一方，計算機の進展で言うと，だんだん情報系ではパターン認識など，方程式を解くようなこととは違った処理が要求されてきました．計算機の発明の原点である数値計算そのものも，情報分野では主流ではなくなってきてしまったため，フォン・ノイマンが元々やりたかった所から計算機応用の研究が離れていってしまったと言えますね．

物理の先端では，理論は立てられても計算が難しいという例がたくさんあるので，それを解決するためにシミュレーションをします．例えば最近では，ダークマターやダークエネルギーなどの計算など，物理的な原理のみから，世界や宇宙の誕生や発展をシミュレーションしています．今や物理は，シミュレーションが発展の鍵となっているといっても過言ではないでしょう．

物理では，計算の精度がわかる以前に高度に複雑で難しい数値計算の限界の所で，何とか物理的な結果をシミュレーションで得ようとしている状況です．数値計算の誤差を調べる理論が進んできても，そのような分野にはまだまだ適用できないという現状があります．

人間の知への欲求というのは限りないものです．そういう意味で，物理にとっての数値計算は，物理現象を予測するためのある種の実験であり，物理イメージをつくるためにあると言えます．

工学は，物をつくる世界なので，すでにわかっている原理でデザインをする上で，人間の手ではできないような複雑な所に数値計算は力を発揮しています．物理に比べると原理はわかっていますがそれでも設計対象の複雑度は高いと言えます．

こうしてみると，数学，物理，工学において，それぞれに数値計算が発展してきた理由が別なので面白いのですが，どの分野でも数値計算結果の精度がわからないという点で共通点があります．コンピュータは1940年代に発明されましたから，60年以上そういう状況が続いてきたわけです．

ところが最近になって，数値計算結果の誤差を押えるための精度保証付き数値計算の理論が実用になってきました．これは，真の値を含む区間を計算しようというものです．

原理は1950年代の須永照雄先生の修士論文で提示された区間解析です．例えば，π の値は全部の桁を言うことはできませんが，3.14と3.15の間にある，と言うことはできます．そこで，数を使う代わりに両端が計算機で表せる区間を数の代りと考えます．そして区間の四則演算を考えます．

須永先生は連続群論からそういったアイデアを得ており，数理科学的にも深い洞察からこの解析を考えられました．この区間解析は，日本以外にも世界の何カ所かで同時期に発明されて，それぞれ数値計算に使おうと試されました．四則演算を

区間演算に置き換えて区間ガウスの消去法などが考えられました．しかし，実際に計算してみると区間が広がってしまい，意味のある結果が得られないことがすぐにわかりました．

そういう意味で区間解析は一度は流行したのですが，結果としてあまり役に立たないとわかったことで廃れていきました．

しかし，そういう中でブレークスルーが出てきました．検算だけ区間解析を使うという新しい発想です．これは，例えばガウスの消去法は数値解だけを計算するのに用い，その数値解の誤差は，ある不動点定理を用いて計算します．この検算は行列の積だけですむことが示せます．私は行列積の計算の精度保証はうまくできることを示しました．これだと現状では数百万次元までの連立一次方程式の数値解の精度保証ができるようになっています．

数学の命題を精度保証付き数値計算で行うという方向でも，数百万次元で解けるものも出てきましたので，それならば解ける問題もたくさんあるはずだと気づかれ始めてきており，例えば，ローレンツ方程式のカオスの存在証明に精度保証付き数値計算が使われました．

フォン・ノイマンやチューリングが数値計算結果の誤差の保証は極めて難しいといってスタートした現代数値解析ですが，ウィルキンソンによって後退誤差解析が発明されて数値アルゴリズムの安定性が示されるようになりました．そして，精度保証付き数値計算の発展によって数値計算による命題の証明法が数学者の手の中に入るようになったのです．

工学のほうでも，数値計算誤差まで完全に考えた誤ることのない設計アルゴリズムを創ろうという所まで来ました．物理でも超大規模でなければ，シミュレーション結果を厳密に検証できる所まで来ています．

こうして，数値計算の世界が非常に広がってきていますので，面白いアプリケーションが次々とでてくると思います．例えば計算カオス理論や精度保証付きシミュレーション，間違いのないアルゴリズムなど，いろいろな分野が物理，工学に出てくる可能性があると思います．

2. 数値計算の今後

――こうした数値計算の手法ですが，今後はどういったことに使われたり，あるいはどういうように発展していくでしょうか．

数値計算には，線形計算を直接法で解くか，反復法で解くかの2つが主にあるのですが，反復法の精度保証は手間がかかってしまうという難点があります．精度保証法と，反復法との相性の悪さをどう解決していくかが問題になっています．

直接法をもっと大きい方程式に適用するようなブレークスルーが出るか，それをやってくれる若い研究者が出てくれるといいですね．私のライフワークもその辺りにあるのですが，若い力が必要だと思っています．

それともう一つあるのが，本特集でも荻田先生が取り上げているエラーフリー変換という，誤差なし計算というものができるようなったのが数値計算の面白い発展だと思います．これは，世界でも私たちの研究が中心になっているのですが，加減算と乗算に関して浮動小数点計算での誤差の誤差が浮動小数点計算でできることに原理があります．すなわち加減乗除の厳密な誤差まで計算できます．

今までの数値計算は，計算をしていくと初期の情報が失われるという世界だったのですが，この方法でやると誤差なし計算ができるので，数値計算の精度が自分の欲しい桁までとれるようになります．非可逆過程で計算をするのが従来でしたが，誤差なし計算をすれば情報のロスがない計算ができ，かつ高速性が保たれます．

例えば，この方法によって絶対誤らない工学のアルゴリズムを実現することができます．

誤差なし計算を使うことで問題の難しさを精度方向に押し込めるというような発想によって，問題を解くための新しいアルゴリズムを創造する，そういう世界が数学の中でも発展していくのではないかと思います．

それと，数値計算の数学的な理論というのは，ある意味で構成的数学になっていると思うんですね．構成的数学というのは解を計算してあげるということなのですが，精度保証の理論というのは，任意に誤差の許容範囲が与えられたときに，その許容誤差範囲中の数値解を計算するアルゴリズムを作るという研究ですので，まさに構成的数学と言えます．

そうすると，構成的実数が可算無限個しかないので，数学全体の枠組みからすると非常に狭いわけです．また，論理構造も普通の古典論理とは違って，それが存在するかしないか判定できないといったような体系になります．そこに計算速度を考えたものが精度保証の理論ではないかと思います．

そういうことで，数値計算の世界でできることは，人間の頭の中で考えていることから見るとある意味で狭いのですが，物理などを記述するには十分ではないかと思います．そういう意味で，数値計算できる対象だけを相手にしようという考え方は，数学の理論体系の中ではものすごく狭いと思いますが，現実世界を記述するには十分だと言えると思います．

最近では，数式処理の範疇の問題でも精度保証付き数値計算でやると非常に速くなるものが多くあることがわかりつつあり，数学の知識と数値計算を組み合わせた計算を計算機の中でやるということも，今後の展開として考えられるのではないかと思っています．

3. 数値計算を研究するために

――数値計算の分野を研究するにあたってはどんなことを勉強しておけばよいでしょうか．また，どんなことに対して問題意識を持てばよいでしょうか．

その分野の専門の知識を全部身につけていって，理解していくという方法もあると思いますが，果たしてそれが数値計算の世界でよいのかどうかは分かりません．

長くやればそれだけ知識は身に付いていきますが，数値計算に限らず科学技術の世界というのは，現状にあるものは単にできたものだけがあるのであって，完全であるわけではありません．一見壮大な宮殿のように見えても，それは今の見え方であって，違う時代や違う問題意識の人が見れば変わってきますので，数値計算以外のモティベーションも必要だと思います．

私自身の経験で言うと，もともと学位論文はソリトンの研究をしていて厳密解を求めるのがテーマだったのですが，佐藤理論が出てきて，それによって説明されてしまったためにいくつか論文を書く予定があったのですが書けなくなったのです．そのとき持っていたのは，厳密に解きたいという問題意識だったのですが，その意識は保ったまま佐藤理論のような代数的な理論では説明できない非代数的な分野に行こうと考えました．

従来の数値計算はウィルキンソン流の後退誤差解析だったので，自分としては肌に合いませんでした．そこで，普通の数値計算の人とは違う数学的に正しい結果を数値計算で導くという問題意識で研究し始めました．やってみるといろいろ定石のようなものも分かってきました．

例えば，連立1次方程式はガウスの消去法が使われるのですが，キャッシュメモリなどのコンピュータの資源を有効に使うことで数十倍速く計算することができるのです．これを最適化と呼んでいるわけですが，多くの数値計算の専門家は最適化の研究者になっているんですね．

結局は，なぜ速さが必要かというと，難しい問題を解くために速く計算できなければならないわけです．精度保証の分野に入ってみると，もとも

とやりたいと思っていた非線形方程式を解くには，基礎に立ち返って線形計算の精度保証理論を完成させなければいけないということがわかってきて，そこをまず完成させようとしました．ようやく20年近く研究してほぼ満足のいくレベルに到達しました．

こういうことは問題意識がないと出てきませんので，数値計算をやるというより，何か自分の分野に問題意識があって，もともと自分が何をやりたかったかを大事にして勉強すると，数値計算が見えてくるのだと思います．

ウィルキンソンのような議論を追いかけるのも壮麗なものだと思いますが，例えば，本誌を読んで数値計算に興味を持ったとしても，今やっていることを大事にして，その立場から数値計算を眺めるというのが非常によいのではないかと思います．

4. 影響を受けたこと

――先生が研究者になるに当たって影響を受けたことをお聞かせ下さい．

割と野望をもった学生だったのかもしれませんが，私は背伸びをするのが好きな学生だったようで，碁で言えば足がはやく，いろいろ石をぽんぽん置いていって自分の陣地をつくっていくようなことが好きでした．

大学に入ってすぐ，量子力学にとてもショックを受けて，ディラックとかファインマンや朝永振一郎，渡辺慧などを学部のときは読みあさっていました．そのあとはだんだん数学に向いていったのですが，いずれにしても足ははやかったと思います．

もともと電気通信の分野にいたので，量子力学を使った通信をやりたいと思っていたのですが，当時そういった研究をしていた先生はいないということもあって，一番近いのを探してみたら，量子力学を使って非線形方程式を解くという分野が見つかって，それがソリトンだったんですね．

私がやっていたのは広田良吾先生の双線形化法というものだったのですが，それは，従属変数の変数変換をして非線形偏微分方程式を2つの従属変数で分数にすると面白いことが起こるというもので，その中に双線形作用素というのが出てきて，方程式の線形項を双線形作用素に置き換えるとソリトンの構造が出てくるんですね．これがいろいろなソリトンの計算の中で自分に一番しっくりしていたので，それが発展して学位論文になりました．

そういったことが，広田先生がやられていたことを拡張する仕事として広がっていき，後にフレドホルム行列式と関係することがわかったり，KP方程式やKdV方程式の解ともつながって，それもまた論文になりました．学部時代に特殊関数や積分方程式を解くのが好きだったこともあったのですが，そういうことも偶然重なって，フレドホルム行列式に関することが広田の方法につながったのは面白かったです．

そのうち佐藤理論が出てきて，それはグラスマン多様体がソリトンのもとになるという話でした．自分が考えていたこともそれに近いところまでアイデアがあって，当時論文も1カ月に1つのペースで出していく構想もあったのですが，佐藤理論によって一瞬にして打ち砕かれてしまったんですね．

広田の方法を拡張して，それまで自分がつくってきた綺麗な花畑が，佐藤理論の出現で一掃されてしまったわけです．それで，代数構造がない世界の厳密解析をしたいと思い，そのモティベーションで今まで来ています．

そういう意味で言うと，佐藤先生のような大数学者に影響を受けて真似したというよりも，吹き飛ばされてしまったので，まったく反対側の世界にいったと言えますね（笑）．

それと，助手になるときに指導教授の研究の方向も考えました．そういう意味で指導教授の影響もあったのですが，先生は数値計算はしない．ならば自分は数値計算をしようという，どちらかというとアンチ的なほうにいった傾向があったと思

います．

研究者になるという定義は難しいのですが，指導教授が助手に推薦すると言われたときの印象はまだ覚えています．とても驚いたのと嬉しかったことですね．職を得ることがそれでしょうね．

数学はどの分野にも天才はいるので，その天才との戦いなのではないかと思いますが，その天才の後を追って，違う仕事をするのは難しいですから，その天才と違う土俵にいくのか，どちらを選ぶのかも面白さだと思います．

5. メッセージ

――今後，研究者を目指す方や学生さんへのメッセージをお願いします．

すべての学生さんが研究者になってくれたら嬉しいのですが，研究者というのは先生が頑張ってみても育てられないと思うんですね．やっぱり自分で育つしかないと思います．

そういう意味でいうと，自分で育つ人を先生はサポートすることはできるのですが，育たなかったときには先生が悪かったと思って欲しいと思っています．環境を変えてみるしかないと思います．

環境を変えるというのはなかなか難しいのですが，180度転換するぐらいの気持ちでやったら，また面白い世界が開けてくることもあると思います．

また，研究者になるというのはリスクはあります．しかし，逆に言えば，リスクをおかすというのは面白いことですよね．

やはり，人間は他の人間の中に立ち入れないというのでしょうか，指導の限界のようなものも感じます．才能とか能力というのは指導者も本人もわからないと思いますが，人間にはものすごい能力があると思いますから，それを信じて，大事にしていってほしいです．

そういう意味で，自分を大事にして，自分が思ったことを素直に受け止めていくのがいいと思います．

例えば，逆説的にいうと“何々ができない”というのが大事ではないかと思います．指導の先生が「これをやりなさい」と言ってもそれができないときは，それは場合によってはチャンスで，考えてみたら先生の指す方向でない所にその人だけの世界ができるかもしれない．できないことも自分にとっては才能だと思って，伸びていってほしいです．

――本日は貴重なお話をお聞かせ下さり，誠にありがとうございました．

（2011年2月，
早稲田大学西早稲田キャンパス研究室にて）

（おおいし・しんいち，早稲田大学理工学術院）

行列解析の基礎

Advanced 線形代数



山本哲朗著，B5 判，224 頁，本体 2190 円，サイエンス社

本書の主題である“行列”や“線形代数”に関する入門書や“易しい”参考書・テキストは数えきれないほどあるが，いずれも通り一遍の類型的なもののように見える．これは，専門分野が未定の多数の学生を対象とするときには致し方ないことなのかもしれない．学部上級課程・大学院課程の学生を対象とした，より進んだ内容の本が我国でも少しずつ現れてきているのは喜ばしい．もちろんそれらの著書は類型的にはなりえず，著者の人柄と意図とが表に出た特徴のあるものになるのは必然である．

本書の著者の山本哲朗先生は永年にわたり，数学者としての矜持を保ちつつ数値解析・数値計算のような応用分野にも多大の貢献をしてこられた方なので，進んだ内容の多くは著者自身の研究成果あるいはそれらに関係のある分野から選ばれている．もちろん，線形代数の中心的・代表的な話題も独自の工夫を凝らして扱われている．

本書の内容は豊かでこの短い書評では紹介しきれないが，敢えて目次の要約を挙げると次の通り．

第 1, 2 章：線形代数の基礎；第 3 章：行列の分解（LU, LL^t, QR, 特異値，極分解，Jordan 分解）；第 4 章：行列ノルムと行列関数（微積分を含む）；第 5, 6 章：AB と BA の固有値，固有値の評価定理（Kantorovich の不等式，Gershgorin の定理，Hermite 形式に関するミニマックス定理や摂動を含む）；第 7, 8, 9 章：非負行列，Z 行列と M 行列，P 行列と P_0 行列；第 10 章：テンソル積；第 11 章：Grassmann 積と複合行列；第 12 章：線形反復法（Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, 共役勾配法）．

これらの広範な話題が著者自身の深く鋭い視線で厳密に扱われているのはある意味で壮観である．第 1, 2 章「線形代数の基礎」は通り一遍の入門コースで学んだ人達が本当に自分が理解しているかどうかを確かめるのにも役立つ．（おそらく，ハッとさせられるところが少なくないであろう．）第 3 章「行列の分解」の中に LU 分解と Jordan 標準形とが同居しているのもすごい．第 5, 6 章では進んだ線形代数の本によく書かれているような話題に加えて，著者が多くの貢献をした反復解法の誤差評価に役立つ Kantorovich と Rheinboldt の定理が扱われているが，これらは第 12 章への準備になっている．第 7, 8, 9 章では非負行列などに関係した話題が丁寧に述べられており，安心して読める内容である．第 12 章は著者が最も得意とする分野の一つであり，どんな話題についても一家言を持っている．Jacobi 反復，Gauss-Seidel 反復とその過緩和等に関する Young や Varga の理論の簡潔で分かりやすい記述を含むが，共役勾配法についての厳密な記述もある．特に，後者については「内外の成書には定理 12.8 の怪しい証明が記されているので注意が必要である」と言っているが，具体的な言及がないので評者の不安が少々煽られた．最後に，出発値をランダムに選んだときの線形反復解の誤差の漸近分布についてあまり類書にはない定理で本書を閉めているのは著者ならではのことと感じた．

このような分野に関心を持つ真面目な学生，研究者はこの先達の持つ経験，知識，見識を是非本書から汲み取って頂きたいものである．ページ数の制限もあるのでこれ以上のことを望むのは無理かもしれないが，話が有理演算の範囲で済むものなのか固有値などの無理演算に訴えざるをえないのかの区別をもっと強調して頂くとか（Sylvester の慣性則など），各種の算法が計算誤差に対してどのくらい頑健なのかについての著者の意見も知りたいと思った．

これは著者に対するというより出版社に対する注文であるが，何もかも“国際化”の現今，国際標準化機構（ISO）やそれを受けて定められている JIS 規格（例えば JIS Z8201「数学記号」など）が無視されているのは少し残念である．

伊理　正夫（東京大学名誉教授）

BOOK REVIEW

「数理科学」は語る

30年前から現代へのメッセージ

山本 哲朗

1981年8月号

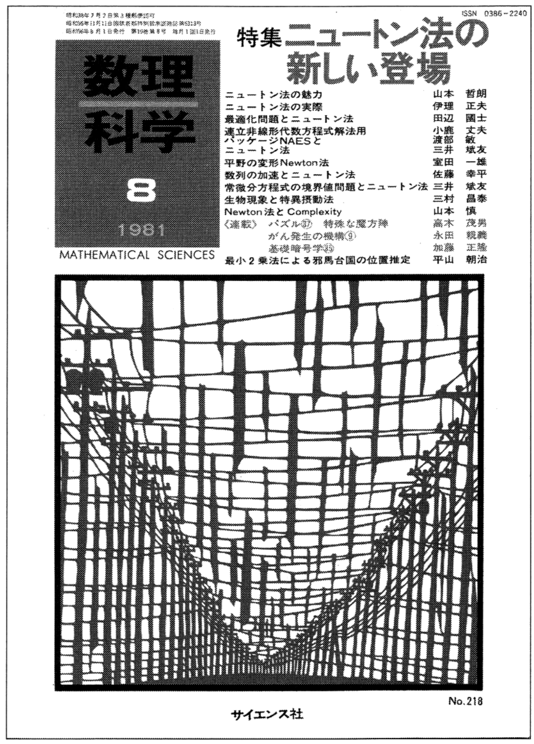
私は1970年頃からニュートン法に魅せられ，関係資料を読み漁ったあげく，既存の数値解法の多くは形をかえたニュートン法にすぎないのではないかという妄想を抱いたことがある．フィールズ賞受賞者S. Smaleも1980年代に突如ニュートン法にのめり込んでしまったから，この方法は人をとりこにする妖しい魅力を秘めているように思える．

1980年のある日森平勇三社長（当時）からニュートン法の特集企画を打ち明けられたとき，一も二もなく賛意を表し，Banach空間におけるニュートン法とKantorovichの半局所的収束定理（1948）（以下定理K）を中心に一文をまとめた．

当時，作用素に対するFréchet微分の概念は抽象的で目新しく，関数方程式に対するニュートン法は新鮮な話題であったと思うが，30年が経過した現在では新しい話題ではなくなっている．しかし，他の執筆メンバー各位の記事はバラエティに富み，今眺めてもあまり古さを感じさせない．ただ，「数列の加速とニュートン法」を執筆された佐藤幸平氏が故人となられたのは残念なことである．

定理KはBanach空間におけるニュートン法に対する最初の半局所的収束定理として名高いが，1次元ユークリッド空間におけるそれはA.L. Cauchy (1829) がすでに与えており，定理Kはその忠実な一般化であることはなぜかあまり知られていない．Cauchyの定理（以下定理C）を定理Kと見比べれば，L.V. Kantorovichが定理Cを参考にしたことは一目瞭然である．

定理Cから定理Kの出現まで実に119年が経過しているが，S. BanachによりB型空間（現在のBanach空間）が導入されたのは1922年であり，これは不思議なことではない．また，n次元空間における最初の半局所的収束定理としてFineの定理（1916）があり，Kantorovich自身も同種の定理を1937年に得ている．しかし定理Kはそれらよりはるかに優雅で豊穣な結果である．それゆえにJ. Ortega (1968) は定理KをNewton-Kantorovichの定理と呼んだ．



尚，定理Kと並んで有名なOstrowskiの定理も明らかに定理Cを参考にしており，両定理には「温故知新」の言葉があてはまる．

私は1969年愛媛大学工学部に助教授として着任したが，上司の安倍齋教授は，当時，研究における「温故知新」を強調されていた．私もこの言葉を若き研究者各位に贈りたいと思う．

私は昔，AMSの露英数学辞書を片手に定理Kの原論文を読んだ．僅か4頁の論文であるが，この論文は多くの示唆に富み，その後の私の研究に大きな影響を与えた．その温故知新を詳しく語るのは他日に譲る．

（やまもと・てつろう，愛媛大学名誉教授）

リレー連載

現象から方程式を創り出す

第19回 —立式で鍛える論理的思考法—

プラズマ現象とブラソフ方程式

遠距離相互作用し合う粒子群の熱力学的非平衡集団現象を記述する

高部　英明

1. はじめに

ボルツマンが1872年に有名なボルツマン方程式を提唱した．それは，気体分子のミクロな運動方程式から気体の熱力学に代表されるマクロな物理を繋ぐ支配方程式であった．これについては本リレー連載，第11回，鵜飼正二氏の解説を読んでいただきたい[1)]．

その後，放電技術の進歩で，分子や原子を電離させた状態の荷電粒子群の振舞いが研究されるようになり，ラングミュアが1928年にその状態に「プラズマ」という名称を与え，多くの研究者がプラズマの研究をするようになった．翌年の1929年にはトンクスとラングミュアはプラズマの振動現象を発見．その後，1947年頃，観測では地球を取り巻く電離層など地球磁気圏の研究がアップルトン卿を中心に行われた．理論的には，モスクワ州立大学のブラソフ教授が1937年に体系だった論文を発表[2)]．プラズマを記述する運動論的方程式では，ミクロにはボルツマン方程式の衝突項は無視するべきであるという，今日のブラソフ方程式を提唱し，その方程式から数学的にプラズマ中の縦波である電子プラズマ波や横波の電磁波の分散関係式を導出した．後年，彼のグループの研究成果を『Many-Particle Theory and Its Application to Plasma』という本にまとめ1950年に出版し，英訳が1961年出版された[3)]．

しかし，ブラソフ教授の1937年の論文での数学的な取扱いは不完全であり，今日のプラズマ物理で非常に重要な概念である，荷電粒子と電場の共鳴的な相互作用の効果が導出し切れていないことを，ランダウが1946年の論文で指摘した．今日，ランダウ減衰と呼ばれている現象を予言した．傍若無人のランダウはそれをブラソフ教授の数学的扱いの不完全さと学会で指摘し，ブラソフ教授との間で軋轢が生じたそうである（多数の面前で非難されたブラソフはランダウに殴りかかろうとしたと聞いている）．

本解説では，第2節でボルツマン方程式から出発し，プラズマの衝突断面積の評価を行う．第3節で，衝突時間や平均自由行程を求め，高温で低密度のいわゆる理想プラズマにおいては，衝突の効果は無視できることを示す．第4節ではプラズマの集団現象で生じる電磁場の中でのブラソフ方程式を解くためにはマックスウェル方程式と連立させて解く必要があることを指摘し，ブラソフ・マックスウェル方程式を示す．第5節では分布関数が十分小さな電場擾乱で歪んだ場合の電子プラズマ波の分散関係式の導出をブラソフの論文に従い行う．第6節では，前節でブラソフが数学的に

完全に明らかにすることができなかったランダウによる新しい項を因果律に従い，自然に導出する．第 7 節では，完全には衝突項は無視できないが，小角散乱の積み重ねによる衝突効果が支配的なプラズマの場合に衝突項を速度空間で局所近似で表現したフォッカー・プランク方程式について説明する．第 8 節はまとめと，近年，重イオン加速器 RHIC や LHC の実験で注目を集めるクォーク・グールオン・プラズマに対する電磁力ではない量子色力学に支配されたプラズマのブラソフ方程式の話題を簡単に紹介する．

2. ボルツマン方程式

プラズマという理想的には完全電離した気体の力学を記述する方程式はボルツマン方程式が出発点である．例えばプラズマが電子気体とイオン気体の負と正の電荷を帯びた粒子の集団と考えよう．電子の速度分布関数を $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)$ とする．これは電子がある時刻 t に位相空間 $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})$ の点に存在する確率を示す．分布関数に関する支配方程式はボルツマン方程式で

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=\left(\frac{df}{dt}\right)_{\rm coll}, \tag{1}$$

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\rm coll} = \sum_{\alpha=i,e} n_\alpha \int d\boldsymbol{v}_1 \int d\Omega \frac{d\sigma_\alpha}{d\Omega}|v-v_1| \times\left[f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}',t)f_\alpha(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1',t)-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)f_\alpha(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1,t)\right]. \tag{2}$$

ここで，$\alpha=i,e$ はイオンとの衝突，電子との衝突を表す．式 (2) の中の σ_α は衝突断面積．(2) の表式からわかるように，ボルツマン方程式では衝突は瞬時に起こり，その結果，分布関数は速度空間を非局所的に変化することを仮定している．これはボルツマン方程式が分子など中性粒子がビリヤードの球どうしのように一点で衝突し，瞬時に速度を大きく変えることを前提にしているからである．

(2) 式で速度を表す 4 つの表式は独立ではなく，電子がイオンや他の電子とクーロン力による弾性衝突（ラザフォード散乱）を行うと考え，衝突前後での運動量，エネルギーの保存関係から $\boldsymbol{v}',\boldsymbol{v}_1'$ は $\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}_1$ の関数であることに注意する．このようにして，プラズマ気体に対するボルツマン方程式を形式的に与えることができる．

プラズマ中でのクーロン散乱による衝突はどの程度重要かを評価してみよう．ラザフォード散乱の衝突微分断面積はよく知られているように

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{Z_\alpha e^2}{8\pi\varepsilon_0 m v^2}\right)^2\sin^{-4}\left(\frac{\theta}{2}\right). \tag{3}$$

ここで，θ は散乱角度で散乱は軸対称，v は相対速度であり $v=|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_1|$ である．また，$d\Omega=2\pi\sin(\theta)d\theta$ であることから，もし，$\int_{\theta=0}^{\theta=\pi/2}\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega$ を行えば，$\theta=0$ 近傍で発散することがわかる．このことからラザフォード散乱を直接，使うことはできない．$\theta=0$ 近傍とは衝突パラメータの大きい小角散乱である．実際のプラズマ中では遠く離れた場所での小角散乱は起こらない．そこには物理的な理由があり，クーロン力は真空中のようには無限遠方まで到達しないからである．プラスの電荷はマイナス電荷で遮蔽され，その逆もしかり．従って，この**デバイ遮蔽**といわれる概念を使う必要がある．デバイ遮蔽の導出は省略して結果だけを書くと，実効的な散乱体のクーロンポテンシャルはいわゆる湯川型ポテンシャルとなり有限距離しか力は働かない．その距離が**デバイ長** λ_D とよばれ，ポテンシャルの形は以下の数式で表される．

$$\phi=\frac{Z_\alpha e}{4\pi\varepsilon_0 r}e^{-r/\lambda_D}. \tag{4}$$

大角散乱を受ける断面積は，散乱される電子の運動量が散乱体から受ける力積程度と考えると，以下のように大方の値を簡単に求めることができる．

$$mv=F\varDelta t=\frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\times\frac{r}{v} \tag{5}$$

この関係より得られる半径を r_0 として大角散乱の断面積 σ_0 は

$$\sigma_0=\pi r_0^2=\pi\left(\frac{Z_\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 m v^2}\right)^2 \tag{6}$$

と求まる．デバイ長までの小角散乱も考慮すると，実効的な衝突断面積は

$$\sigma_{effc}=\sigma_0\ln(\lambda_D/r_0) \tag{7}$$

となることが知られている．この対数はクーロン対数と呼ばれ，典型的な値は 10 程度である．

3. 衝突時間と平均自由行程

プラズマは物質の第四の状態と言われる．物質を加熱すると，固体，液体，気体，その次が原子の電子まで剥ぎ取られたプラズマ状態である．従って，一般に温度は大変高いが密度は低い．自由な熱運動をしている電子ガスの温度 T は

$$\left\langle \frac{1}{2} mv^2 \right\rangle = \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} T \tag{8}$$

と定義される．ここで，$\langle\ \rangle$ は平均値を示し，k_{B} はボルツマン定数である．電子の平均衝突時間 τ_{C} は (7) 式より

$$\tau_{\mathrm{C}} = \frac{1}{n \langle \sigma v \rangle} = 3 \times 10^5 \frac{T^{3/2}}{n} \,(\mathrm{s}) \tag{9}$$

となる．右辺は T (eV)，n (cm^{-3}) の単位での値である．例えば磁場核融合が目指す温度密度は，10 keV で $10^{14}\mathrm{cm}^{-3}$ である．このときの衝突時間は 0.003 秒（プロトンは 0.2 秒）．これは現在の実験でもプラズマの閉じ込め時間と同程度であり，プラズマはほとんど衝突を起こさない，**無衝突プラズマ**であると考えて良い．

一方，宇宙のプラズマを考えてみよう．平均自由行程 l_{C} は

$$l_{\mathrm{C}} = \frac{1}{n \langle \sigma \rangle} = 1.4 \times 10^{12} \frac{T^2}{n} \,(\mathrm{cm}). \tag{10}$$

地球から 7100 光年離れたところで，1006 年に爆発が観測された超新星 1006（SN1006）は，現在も秒速 3000 km/s の速度で宇宙空間に膨張している．その X 線イメージを図 1 に示した．この直径は約 30 光年であるが，式 (10) から平均自由行程を計算すると，温度が高いことや密度が $1\,\mathrm{cm}^{-3}$ 程度であることから，平均自由行程のほうが広がる爆風波の直径よりずっと長いことがわかる．ところが，図 1 から明らかなように爆風波は急峻な衝撃波面を持っている．プラズマでは電磁場乱流が発生し，その特徴的なサイズは平均自由行程より何桁も短いことから実効的な乱流粘性で衝撃波ができる．このような衝撃波は**無衝突衝撃波**とよばれ，宇宙線の加速機構に大変重要な波面である．

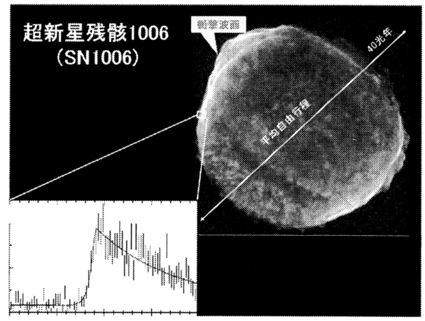


図 1　無衝突プラズマ中に形成された衝撃波．1006 年に爆発が記録されている超新星の残骸の X 線天文衛星によるイメージとその衝撃波面の X 線強度分布の拡大図．平均自由行程の 1/1000 程度の幅で衝撃波面が形成されている（Aya Bamba *et al.*, *The Astrophysical Journal*, **589**:827–837, 2003 を元に作成）．

上に見てきたように現象が起こる時間より，クーロン衝突の時間が十分長い．つまり，プラズマの諸々の現象は (1) 式の右辺を無視して記述されると考えて良い．このボルツマン方程式の右辺を無視した方程式をブラソフ方程式という．

4. ブラソフ・マックスウェル方程式

プラズマ中では外場だけでなくプラズマ自身が電磁場を作る．従って，ブラソフ方程式はマックスウェル方程式と連立して解く必要がある．この基礎方程式をブラソフ・マックスウェル方程式という．

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \boldsymbol{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \boldsymbol{v}} = 0, \tag{11}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \tag{12}$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \boldsymbol{B} = \boldsymbol{j} + \varepsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}, \tag{13}$$

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \boldsymbol{E} = \rho, \tag{14}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \tag{15}$$

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_\alpha q_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} f_\alpha d\boldsymbol{v}, \\ \boldsymbol{j} &= \sum_\alpha q_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{v} f_\alpha d\boldsymbol{v}. \end{aligned} \tag{16}$$

クーロン散乱は波長がデバイ長程度の電場による散乱である．衝突効果を無視したということは，上記で扱う電磁場の波長はデバイ長より長い集団現象により生じる電磁場を取り扱うことになる．実際，無所突プラズマの輸送などを支配する物理は**異常輸送現象**とよばれ，プラズマが熱力学的に非平衡な状態から平衡な状態に遷移する過程で，プラズマ中に存在する色々なモードの波動が不安定となり，電磁場乱流が生じ，その電磁場が電子，イオンの熱運動からの軌道を歪ませ，実効的な衝突の役割を担う．このためにクーロン散乱で評価した古典的な輸送に比べ異常に大きな粒子やエネルギーの輸送が起こり，プラズマ物理学を**複雑系の物理**にしている．一般に，以下に説明する線形波動の場合以外は解析的にブラソフ方程式を解くことは困難であり，計算機シミュレーションで時間発展を探る．

5. 電子プラズマ波

空間 1 次元平面内を伝搬する電子のみが寄与する波動についてブラソフ方程式の線形解を求めてみよう．電子の分布関数が，微少な静電ポテンシャル φ で歪んで

$$f = f_0(v) + f_1(x, v, t) \tag{17}$$

と分布関数が表せるとする．すると，式 (11), (14), (16) より次の線形化した関係式が得られる．

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1 + v\frac{\partial}{\partial x} f_1 + \frac{e}{m}\frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial v} f_0 = 0, \tag{18}$$

$$\varepsilon_0 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi = e\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 dv. \tag{19}$$

ここで，例えば f_0 はマックスウェル分布と考え，空間，時間には依存しないとする．今，その平衡分布のプラズマに擾乱が起こる．その擾乱をフーリエ分解して，波数 k を持つ成分に対する関係式に代えると

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1^k + ikvf_1^k + ik\frac{e}{m}\frac{\partial f_0}{\partial v}\varphi^k = 0, \tag{20}$$

$$\varepsilon_0 k^2 \varphi^k = -e\int_{-\infty}^{+\infty} f_1^k dv. \tag{21}$$

さらにラプラス変換を行い，

$$\varphi^{k,\omega} = \int_0^{\infty} \varphi^k(t)\,\mathrm{e}^{i\omega t} dt. \tag{22}$$

代数方程式を書き換えると

$$\varepsilon(k,\omega)\varphi^{k,\omega} = 0, \tag{23}$$

$$\varepsilon(k,\omega) = \varepsilon_0 + \frac{e^2}{k^2 m}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{\partial f_0}{\partial v}}{v - \frac{\omega}{k}} dv \tag{24}$$

と求まる．ここで，ブラソフは 1937 年の論文で，$v = \omega/k$ の特異点の処理に困り，この積分をコーシーの主値積分を用い，次のように近似した．

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{\partial f_0}{\partial v}}{v - \frac{\omega}{k}} dv = \lim_{\varepsilon \to 0}\left(\int_{-\infty}^{\frac{\omega}{k}-\varepsilon} \frac{\frac{\partial f_0}{\partial v}}{v - \frac{\omega}{k}} dv + \int_{\frac{\omega}{k}+\varepsilon}^{+\infty} \frac{\frac{\partial f_0}{\partial v}}{v - \frac{\omega}{k}} dv\right). \tag{25}$$

そして，マックスウェル分布を仮定し，$\omega/k \gg v$ の近似の元に分母をテーラー展開し，積分を実行することで次の分散関係式を得た．

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2}\left(1 + 3\frac{k^2 v_e^2}{\omega^2}\right). \tag{26}$$

ここで，v_e は電子の熱速度（$v_e^2 = k_{\mathrm{B}}T/m$）．これから $\varepsilon = 0$ で右辺括弧内の $\omega = \omega_{pe}$ と近似することで

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + 3k^2 v_e^2 \tag{27}$$

と電子プラズマ波に関する分散関係式が求まる．

(22) 式から明らかなように $\varepsilon(k,\omega) = 0$ はプラズマ媒質の共鳴関係を表す．これを満たす $\omega = \omega(k)$ は分散関係式とよばれる．主値積分を行うと $\varepsilon(k,\omega)$ は必ず実関数になる．もしこの実関数が実数 k に対し，複素数 ω の根を持つときは必ず，複素共役の形であるから，ラプラス逆変換をすると必ず，時間と共に成長するモードが現れる．例えば今の静電モードで有名なのは**二流体不安定性**である．プラズマ中に電子ビームが入射したり，図 1 に示したように，超新星爆発で噴射プラズマが周りのプラズマに入射していくときに起こる．しかし，同時に，ここでは議論しなかった**ワイベール不安定性**とよばれる磁場不安定も生じる．詳しい研究の結果，後者のほうが非線型段階も含め支配的で，非線型過程を経て最終的に図 1 のような衝撃波面を形成することが指摘されている[4]．

6. ランダウの解法

(27) 式の分散関係式を見る限り，電子プラズマ波の振動数は実数で，いつまでも振動を続けるように思える．ところが，現実には波は減衰する．プラズマ特有の物理機構による減衰である．それは，電子の分布関数の形状と電子プラズマ波の位相速度に関係して，減衰にも成長にもなる物理機構である．これは，高温プラズマのように運動論的な扱いが本質的である場合にのみ現れる現象であり，通常の流体や中性ガスでは見られないプラズマ固有の現象である．ブラソフの論文（1937 年）から 8 年後，1946 年にランダウ（当時 38 才）が (18), (19) 式を (24) 式の特異点の効果も含め厳密に解いた結果，全く新しい物理現象を発見した．以下に説明する物理現象は彼の名にちなんで「**ランダウ減衰**」とよばれている．

ランダウは (18), (19) 式を初期値問題として厳密に解き，(22) 式の積分の収束性に注意を喚起した．つまり $\varphi^k(t)$ が時間的に成長する関数であっても積分が収束するためには，ω は複素数で $\mathrm{Im}(\omega) > 0$ でなければいけない．その上で，v の実軸に近づけると図 2 のように特異点 $v = \omega/k$ を迂回する必要がある．この無限小の半円からの寄与も (24) 式の積分の際，計算する必要がある．無限小の半径の半円からの積分は簡単に行うことができ，その結果 (26) 式には主値積分の寄与に以下の虚数部が付加されることがわかる．

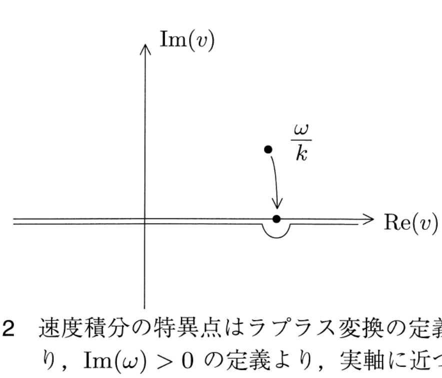


図 2　速度積分の特異点はラプラス変換の定義より，$\mathrm{Im}(\omega) > 0$ の定義より，実軸に近づけなければいけない．結果として特異点周りの積分が現れることが明らかである．このような積分路をランダウの積分路という．

$$\left.\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right|_{im} = -i\pi \frac{\omega_{pe}^2}{k^2 n_0} \left.\frac{\partial f_0}{\partial v}\right|_{v=\frac{\omega}{k}} . \tag{28}$$

(26), (28) の誘電率 ε の根を求めるとき，$\omega = \omega_r + i\omega_i$ とし，虚部の絶対値が実部のそれに比べ十分小さいとして ε をテーラー展開して解くと，以下のように求まる．

$$\frac{\omega_i}{\omega_r} = \frac{\pi}{2}\frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \left.\frac{\partial f_0}{\partial v}\right|_{v=\frac{\omega}{k}} . \tag{29}$$

例えばマックスウェル分布をした電子では，$\omega_i < 0$ となる．波の振幅は時間的に $\exp(\omega_i t)$ に比例して減衰していくことが分かる．この現象を**ランダウ減衰**（Landau damping）という．

ランダウ減衰は式の導出からも想像できるように，$v = \omega/k$ の速度を持った粒子が波と直接相互作用することによる．波の位相速度と同じ速度を持った粒子を共鳴粒子といい，波の電場と直流的に相互作用する．つまり，波と粒子が共鳴粒子を介してエネルギーをやり取りする．波から粒子にエネルギーが移る場合，波の減衰となり，逆に，$v > 0$ の部分で $\partial f_e/\partial v$ が正の場合，$\omega_i > 0$ となり，波は成長する．このような波の成長は**逆ランダウ減衰**（inverse Landau damping）とよばれている．(27) の分散関係式から明らかなように，電子プラズマ波の波長はデバイ長に比べて十分長くないといけない．波長が $k = 1/\lambda_D$ 程度になると，(27) 式より波の位相速度が電子の熱速度程度になると，$\omega/k \approx v_e$ となり (29) 式の虚数部が大きくなり，波は生成してもすぐ減衰してしまう．従ってブラソフ方程式の前提で述べたように電子プラズマ波の波長はデバイ長より十分長くなり，無衝突の過程を満たす．

7. フォッカー・プランク方程式

プラズマのパラメータによっては衝突項を無視できない場合も多くある．そのとき，第 2 節で述べたようにプラズマでは衝突パラメータが散乱中心電荷のデバイ長程度で，2 体衝突というよりデバイ球内の多数の荷電粒子との相互作用の結果，散乱を受けると考えなければいけない．それも小角散乱の積み重ねにより荷電粒子の運動力が変化し

ていくことから，一回の衝突での速度変化 $|\boldsymbol{\Delta v}|$ は散乱される荷電粒子の速度 $|\boldsymbol{v}|$ に比べ十分小さい．さらに，散乱時間も瞬時ではなく有限時間 Δt かかる．これは，(2) 式の非局所的速度変化ではなく，局所的な速度変化が衝突により起こることを示唆する．この場合は，(2) 式をボルツマンが提案した仮定が成立しない．そこで $\boldsymbol{v}$ の分布の散乱による $\boldsymbol{\Delta v}$ の変化の確率を $W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v})$ とすると，次の関係が成り立つ

$$f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) = \int f(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{\Delta v}, \boldsymbol{r}, t - \Delta t) W(\boldsymbol{v} - \boldsymbol{\Delta v}, \boldsymbol{\Delta v}) d(\boldsymbol{\Delta v}). \tag{30}$$

小角散乱を仮定し，かつ，その Δt の時間での分布関数の変化がわずかであることを考えると，(30) 式をテーラー展開することができて，

$$f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) = \int \left\{ \begin{array}{l} f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v}) \\ -\Delta t W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v}) \dfrac{\partial f}{\partial t} \\ -\boldsymbol{\Delta v} \cdot \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{v}} [f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v})] \\ +\dfrac{1}{2} \displaystyle\sum_i \sum_k \Delta v_i \Delta v_k \dfrac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \\ [f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v})] \end{array} \right\} d(\boldsymbol{\Delta v}) \tag{31}$$

のように 2 次まで残した式を得る．これより $\int W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v}) d(\boldsymbol{\Delta v}) = 1$ の関係に注意すれば，(2) 式の右辺として

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_{\text{coll}} = \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\left\langle \frac{\Delta v_i}{\Delta t} \right\rangle f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left[\left\langle \frac{\Delta v_i \Delta v_k}{\Delta t} \right\rangle f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) \right] \tag{32}$$

と速度に関する局所近似，つまり，微分形式で近似することができる．ここで，

$$\left\langle \frac{\Delta v_i}{\Delta t} \right\rangle = \frac{1}{\Delta t} \int f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v}) \Delta v_i d(\boldsymbol{\Delta v}) \tag{33}$$

$$\left\langle \frac{\Delta v_i \Delta v_k}{\Delta t} \right\rangle = \frac{1}{\Delta t} \int f(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}, t) W(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{\Delta v}) \Delta v_i \Delta v_k d(\boldsymbol{\Delta v}) \tag{34}$$

と微分の中の係数はその時刻での分布関数の平均値で定義される．ということは，(32) 式の係数は分布関数の積分値で決まるのであり，(32) 式は非線型な微分積分方程式である．

衝突項としてブラソフ方程式の右辺に (32) のように速度空間での二階微分までを含む方程式をフォッカー・プランク方程式という．この方程式は荷電粒子のプラズマの場合だけでなく，銀河形成など重力場という遠距離力による相互作用での銀河の時間発展などを追いかける研究にも用いられる．速度空間が軸対称な場合，円筒座標系（v_r, v_θ）で記述でき，(33) は v_r 方向への摩擦力による変化，(34) は v_r 方向のエネルギー変化を伴う拡散と，v_θ 方向のエネルギー変化はなく，運動量のみ変化する拡散に分解できる．

フォッカー・プランク方程式の特徴は①分布関数が負になることはない，②粒子数保存，運動量保存，エネルギー保存を満たす，③空間均一の場合，ボルツマンの H-定理を満たす，つまり，どのような分布関数から出発しても最終的な分布関数はマックスウェル分布になる．このような物理的な要請を満たした衝突項を与えてくれる．

図 1 に示した超新星残骸などの波面のサイズは平均自由行程の 1/1000 程度である．従ってブラソフ方程式で大変いい近似になるが，実験室でこのような無衝突衝撃波を模擬しようとすると，波面と平均自由行程の比をこんなに大きく取ることは，よほど大きな装置でないと難しい．従って無衝突衝撃波にクーロン衝突がどの程度影響を与えるかなど考察する必要が出てくる．その場合，このようなフォッカー・プランク方程式を解くことになる．

8. 最後に

ブラソフ方程式は理想プラズマの運動論的現象

を記述する方程式である．その歴史的背景を説明し，電子ガスやイオンガスの分布関数 $f(\boldsymbol{v},\boldsymbol{r},t)$ に対するボルツマン方程式の衝突項を無視した方程式であることを述べた．特にプラズマでは多数の波動が存在し，波動が不安定となり電磁場乱流が発生し，荷電粒子はむしろこのような集団現象による乱れた電磁場で軌道を曲げられ，異常な粘性を感じる．つまり，実効的な平均自由行程が乱流場で支配される場合が多い．ブラソフ方程式の解法の例として最も典型的な電子プラズマ波の分散関係式をブラソフの解法に従い導出した．しかし，そこには数学的な特異点の処理がなされておらず，ランダウはブラソフ方程式を正しく解いて，波動と荷電粒子の共鳴的な相互作用による「無衝突プラズマでの散逸過程」があることを予言した．このランダウ減衰を導出し，その物理的意味を説明した．

宇宙などスケールが大きく密度も低いプラズマでは理想プラズマの近似が良く成り立っても，実験室のプラズマではデバイ遮蔽された荷電粒子による小角散乱の積み重ねによる衝突の効果を解析する必要に迫られる場合が多い．その場合は，ボルツマン方程式の過程は成立せず，有限だが微少な時間に少しずつ速度空間で移動していく局所的衝突現象と捉えて，ボルツマン方程式のような非局所的な積分表示ではなく，速度空間での摩擦と拡散を示す微分形式で書けることを示した．この方程式はフォッカー・プランク方程式とよばれている．

スペースの関係で解法を書けなかったが，ブラソフ方程式の直接解法としては，多数の粒子を有限の広がりを持つ巨大粒子と考えて，マックスウェル方程式を解く3次元格子の中に，多数の巨大粒子をおいて，その運動方程式を直接，計算機で解く**「粒子シミュレーション」**（Particle-in-Cell Simulation: PIC）手法が広く使われている．一見，ブラソフ方程式の数値解法と異なるように見えるが，粒子数が十分多ければ等価であることは証明されている．当然，ブラソフ方程式を有限差分で解くことも行われているが，高度な数値解法の技術が要求されるため，あまり普及はしていない．

ブラソフ方程式自体は量子電気力学（QED）の電磁場相互作用する系だけでなく，近年話題の**クォーク・グールオン・プラズマ**（QGP）の高温での非平衡運動論を扱う際に拡張して用いられている．この場合は，非アーベリアン系の量子色力学（QCD）が支配する粒子系の運動論になる．例えば，RHICやLHCでの金などの重イオンどうしの衝突によるQGP生成では，QGPの生成時の極めて短い時間の物理現象の理論解析に用いられている．多くの専門家は，時間にして $10\,\mathrm{fm/c} = 3\times10^{-22}$ 秒のQGPの物理をブラソフ方程式が支配すると考えている．そして，解析・シミュレーションを行い，ワイベール不安定性という擬似磁場の成長を伴う不安定と非線型成長による乱流で，かき回され，熱平衡状態になる，つまり，QGPは流体的振舞いに移行すると考えている．その後に，流体からフリーズ・アウトとよばれる粒子への転移を行い，その粒子が大きな計測器で測定されているのが現状である．通常のプラズマでのワイベール不安定性は図1の超新星残骸の無衝突衝撃波を支える乱流の源になると著者たちは2008年に提案し[4]，現在，大型レーザーを用いた実験で超高速のプラズマ対向流を大型レーザーで生成し，実験的に仮説の証明を行っている．この実験は日，米，欧を中心に100人近い研究者や大学院生が国際共同実験として関与するまでに魅力的な研究と捉えられ，成長してきている．

参考文献

1) 鵜飼正二, 数理科学 No.**570**, Dec., pp.69–75, (2010).
2) A.A. Vlasov, *Zh. Eksp. Theo. Fiz* **8**, 291 (1938), この論文は英語版で再発行されている *Sov. Phys. Uspekii* **93**, 444–470 (1967).
3) A.A. Vlasov, *Many-Particle Theory and Its Application to Plasmas*, (Gordon and Breach Science Publishers, Inc., New York, 1961).
4) T.N. Kato and H. Takabe, *Astrophysical Journal Letters* **681**, L93 (2008).

全体的な参考文献

(1) Boyd and Sanderson, *The Physics of Plasmas* (Cambridge Univ. Press, 2003).
(2) Lifshitz and Pitaevskii, *Physical Kinetics*, Vol.10 of Landau Lifshitz Course of Theoretical Physics (Pergamon Press, 1981).
(3) QGPの場合（例えば）：奈良　寧，日本物理学会誌 **65**, No.5, 340–344 (2010).

（たかべ・ひであき，大阪大学レーザーエネルギー学研究センター）

リレー連載

人物で学ぶ物理

創始者の思考で学ぶ

第4回

ランダウの物理学と『理論物理学教程』

小嶋　泉

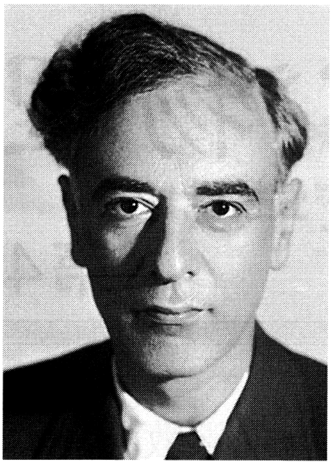
ちょうどこの記事を執筆中の2011年3月11日，未曽有の規模の東日本大震災と津波が東日本を襲い，それに伴って東京電力・福島第一原子力発電所の重大事故が起きた．この一大事件は自然災害と人為災害との結びつきの最悪の一例として，20世紀から我々が引き継いだ「科学技術」，特にその基盤にある工業技術を介した**科学と社会の（目に見えない）深い絆**と同時に，奥深いところでそれらに規定された**科学の中味・科学者の思考の方向・パターン**に対して，根本的な再検討を我々に迫るに違いない．これが決して奇を衒った議論でないことは，19世紀末から20世紀初めの時期，ドイツ鉄鋼業の勃興に際して，溶鉱炉の温度をその色から知る必要が量子論の誕生に導いた歴史を振り返れば明らかだろう．このような背景を，研究者一人ひとりが暗々裡に意識化・明示化されない形で，どう感じ受け止めて人生を生き，研究を進めるか？ ということは，現在我々が立つ歴史的地点からすれば，きわめてactualな問題につながるのではないだろうか．それを考える上で，**ランダウという傑出した20世紀の知性が占める特異な位置**が注目に値する．

当シリーズ「人物で学ぶ物理—創始者の思考で学ぶ」を立案された米谷民明先生が『数理科学』No.573，2011年3月号（pp.75–76）に書かれた趣旨を振り返ると，

「本連載は，･･･ 物理学のこれまでの発展の中で大きな役割を果たした人物を取り上げ，関連深い分野の研究者の方々にそれぞれ自由な切り口で紹介していただこうという企画 ･･･ 人物の伝記的な解説というよりも，人物を通してその人の開拓した物理そのものの理解を進めるのに加えて，その位置付け，最近の進展との関係などについても，読者は興味と認識を深めていただきたいものと思っている」．

それに従えば，必ずしも「伝記」的要素は必須ではないと思われるので，ここでは筋道を追う上で必要最小限の背景確認に留めたい．

レフ・ダヴィドヴィッチ・ランダウは，1908年1月22日，バクーのドイツ系ユダヤ人家庭に生まれ，液体ヘリウムの超流動性の理論的解明の業績によって1962年ノーベル物理学賞を受賞し，1968年4月1日に亡くなった「ソ連を代表する」輝ける理論物理学者である．とりわけ彼の名を冠した『ランダウ・リフシッツ理論物理学教程』は，物理学を多少ともかじったことのある人ならみな周知の，誰もが推奨する素晴らしい教科書として知られている．科学史には無知な筆者がこのシリーズ「人物で学ぶ物理」の文脈でランダウを論ずるなどという殆ど「曲芸」に近い無謀な役割をお引き受



レフ・ダヴィドヴィッチ・ランダウ
（1908.1.22–1968.4.1）

けしてしまったのも，ひとえにこの『ランダウ・リフシッツ理論物理学教程』の素晴らしい中味を巡る幾つかの思いゆえに他ならない．ランダウの生涯とその輝かしい業績についての知識が必要な方は，私の執筆部分は素っ飛ばし文献 1, 2 等をお読みになるようお勧めしたい．

以下で展開を試みる内容を予め概観するならば，

1. ランダウの基本的な発想を巡って
2. 『ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程』の特徴と問題点
3. ランダウの科学，思想，人生観：そこから，われわれは何を学ぶか？

である．まず，

1. ランダウの基本的な発想を巡って

今更繰り返すまでもなく，ランダウの物理学への貢献は極めて多岐の分野とテーマに亙る．その全てを公平かつ適切に概観することは，私ごとき者の手に余る課題であり，最初からそれは諦めて私個人の限られた視点から興味を引かれる少数の問題に焦点化して論ずることをお許し願いたい．とりあえず重要な分野・項目を列挙するとすれば，

二流体模型に基づく超流動現象の解明／
二次相転移・臨界現象の現象論的理論枠の定式化／
超伝導現象の空間的・熱力学的性質とゲージ構造を結びつける「巨視的波動関数」概念＝ギンツブルク–ランダウ理論／
フェルミ流体の理論／
散乱振幅のランダウ–中西特異性／
ランダウ準位と反磁性／
プラズマのランダウ減衰

ということになるだろうか？ また，必ずしもオリジナル論文として展開されたわけではないが，『ランダウ・リフシッツ理論物理学教程』の第 5 巻『統計物理学』（第 12 章 ゆらぎ）と第 8 巻『媒質中の電気力学』（第 13 章 電磁的ゆらぎ）にある「ゆらぎ」の理論は，20 世紀初め，アインシュタインがブラウン運動を論ずる中で始めた熱平衡近傍での微視的ゆらぎの確率論的取扱いを体系的物理的に展開したもので，内容的には，確率論の文脈で後年 Donsker-Varadhan が数学的に定式化した「大偏差原理」の理論（1982）の物理的先駆けと見るべき非常に重要な理論的寄与である．この視点を採ることによって，我々は平衡点・安定点の位置を理論的に定めることができるだけでなく，中心極限定理で扱われる $\sqrt{N}$（N: 関与する系の自由度）程度のゆらぎより大きい $O(N)$ オーダーのゆらぎに対する系の統計的性質を，その経験的測定過程（empirical processes）と結びつける形で vivid に扱うことが可能になる．更に，物理量の値に基づく平衡点・安定点の特徴づけだけではなく，複数の値に亙る統計的ゆらぎを記述する確率分布それ自体を測定量と見る定式化までもが可能であり，それを用いると，「統計的推論」を理論内部に取り込むことも可能となる[3)]．

ただし，個人的偏見かも知れないが，『理論物理学教程』での「ゆらぎ」の議論は非常に錯綜しており，ここから基本的な筋書きを読み取ることは極めて難しい．「彼［＝ランダウ］は数学的厳密さは健全な物理学とは折り合わないと考えていた．しかし必要な数学については，彼はいつも精通していた」というコペンハーゲン時代からの友人カシミールの言葉（文献 1: p.136）や長い年月に亙る重要な共同研究者だったリフシッツによるランダウ自らの言葉の引用：「確率論の課程の必要性は，私

にはおおいに疑問です．物理学者は確率論について知っていなければならないすべてのことを，量子力学と統計力学の課程で学習しているのです」，「存在定理やその証明のような「仰々しい」数学はまったく不必要です」（文献 1: p.175）とは裏腹に，20 世紀後半以降，現代物理学と現代数学との交流は，その密接な相互浸透なしには物理学，数学何れの科学の有効な展開も応用も理解も進まないようなレベルに達してしまった，と見る方がよほど公平ではないか？ と私は思う．この「ゆらぎの理論」＝大偏差原理の場合にも，「確率論について知っていなければならないすべてのことを，量子力学と統計力学の課程で学習」済み，と言い切るのは躊躇せざるを得ない事情が『理論物理学教程』における上の理論状況に露呈している：数学，特に確率論的手法の独自の展開はやはり不可欠であり，またそこでは，「存在定理やその証明のような「仰々しい」数学」も，どんな条件が満たされれば大偏差原理が成り立つか？ という現実的問題に数学的・理論的解答を与える形で，確かに不可欠の役割を演じてもいるのである．

2.『ランダウ＝リフシッツ理論物理学教程』の特徴と問題点

こういう目で，「統一的な方法に貫かれた単一の科学としての理論物理学の完全性という彼［＝ランダウ］の信念」（リフシッツ，文献 1: p.84）を，今の時点で見直せば，その後半部，「単一の科学としての理論物理学の完全性」は，物理学と数学・情報科学・化学・生命諸科学等々，科学の諸分野との有機的連携・相互浸透によって既に掘り崩されつつあると言ってよいだろう．前半部，「統一的な方法」の意味については，『教程』を統制する基本的な指導理念が，普遍的原理から出発する首尾一貫した演繹的展開にあることは誰しも納得の行くこと（例えば，『力学』，『場の古典論』での見事な理論展開）で，そこにこそ，この体系的教科書の大きな魅力と真価があることは間違いない．例えば，[文献 1: p.190] に引用された M.I. カガーノフによれば，最小作用の原理から出発して（E. Noether に依る）対称性からの保存法則の導出が教科書に採用されたのは『力学』が最初であり，ギブスが与えた統計力学の定式化の採用も『統計物理学』が最初だという．

ところが，ランダウ自身の最も重要な理論的貢献として前節冒頭に掲げた，二流体模型に基づく超流動現象の解明／二次相転移・臨界現象の現象論的理論枠の定式化／超伝導現象の空間的・熱力学的性質とゲージ構造とを結びつける「巨視的波動関数」概念＝ギンツブルク–ランダウ理論／フェルミ流体の理論，という諸項目を眺めると，容易に気づくのは次のことである：新しい物理現象を前にして，既知の普遍的原理に基づく理論的理解が未だ得られていないとき，その現象の理論的・実験的解析を進めるのに必要な暫定的枠組として機能する「現象論」を定式化すること，そこにこそ彼の仕事の真骨頂・核心があるのではないか？ ということ．「現象論」とはしばしば「理論として一段下のランク」というニュアンスで使われることの多い言葉かも知れないが，むしろ，既知の原理からの一方向的演繹に比べて，より高次の知の働きを必要とする極めて非自明で高度な認識の形態と見るのが正当ではないだろうか？

こうした意味で，「統一的な方法に貫かれた単一の科学としての理論物理学の完全性というランダウの信念」は，実は自身の重要な科学的貢献を通じて二重三重に裏切られ「破綻」している．極論すれば，むしろその「破綻」のうちにこそ，彼の独創的理論と『理論物理学教程』の核心的な魅力，強力な有効性が現れている，と言えるのではなかろうか？

加えて，この信念がそのまま貫かれた場合の negative な結果の一つが《熱力学の軽視》という形で現れている．90 年代以降，現代的な熱力学教科書の出現が相次いだ[4] ことによって，大学初年級で古色蒼然たる「熱力学」を教わり茫然自失の思いに陥る経験は，現在急速に姿を消しつつあるだろう．しかしそれ以前の世代は，余程聡明な人でなければ殆ど例外なく，「抽象的でつかみどころがなく，意味不明の熱力学」に悩まされた経験を持っ

ている．その経験を経て，ギブスの統計力学を学び，ランダウ・リフシッツ『統計物理学』第2章で軽やかな衣装をまとった熱力学に出会う時，漸く「意味不明の熱力学」の霧が晴れる：もうこれであんな「カビ臭い」熱力学などとはおさらば！ もっと見通しの良い統計力学の中にスマートな形で吸収・発展解消されればOK，という「割切り」である．しかるに，熱力学とは本来，熱機関の非平衡な循環過程をこそ主要なターゲットに据えていたのであり，その文脈では熱平衡状態はその非平衡過程を記述するための便宜的な「語彙」に過ぎなかった．にもかかわらず，統計力学という微視的力学系の統計理論によって熱平衡状態が再定式化されたことによって，熱力学から「非平衡性」と「過程性」という2つの重要な側面が見失われた．それと同時に，《見えないミクロ運動のマクロ的顕れとしての熱》を扱うことで極めて普遍的な領域・文脈で有効性を発揮する熱力学的考察とその一般的基礎をなす普遍的階層論理も，忘却の彼方に追いやられたのである[5)]．こうした流れをもっとも強力に推し進めた元凶の一つがランダウ・リフシッツ『統計物理学』だったと言えるのではないだろうか？

抽象的代数的対象とその具体的解析的表現との間の数学的双対性をテコに，ミクロとマクロの双対的関係，演繹と帰納の双方向的展開へと重心を移動しつつある現代科学の一文脈の存在[6,3)]を考慮すれば，「ランダウの信念」は，今真剣な再検討を必要としていると思われる．例えば，変分原理＝最小作用の原理から出発する『力学』と『場の古典論』の見事な演繹的展開を振り返ると，出発点でa prioriに置かれた「最小作用の原理」の物理的・現実的由来は何だったのか？ ということが気になり始める．それを理論物理学の概念装置一式をhandyに携行するための道具箱，と割切る実用的な見方は十分あり得るだろう．しかし，それだと，「統一的普遍原理」の素姓それ自体は不問に付されたまま棚上げされることになる．「ミクロ・マクロ双対性」[6,3)]に基づく筆者の偏見からすると，「最小作用の原理」を記述する作用積分は，上述の大偏差原理においてゆらぎを記述する “rate function” と結びつけてこそ，その本性が了解可能になるはずである．ミクロとマクロを切り離し，特定の物理的領域とそれを記述する理論に「完全性」を求める発想は，シャープな演繹過程を純化した極限で，「純粋」理論の神秘化にすらつながり兼ねないのではないだろうか？

3. ランダウの科学，思想，人生観：そこから，われわれは何を学ぶか？

周知のように，『ランダウ・リフシッツ理論物理学教程』が企画された元々の意図は，ランダウの指導を求める若者がそのためにパスすべき『理論ミニマム』の試験に備えて自習するための教科書を提供することにあった：彼の指導を受けたルーメルやリフシッツの説明（文献1: pp.140, 161）によると，「ランダウは薄っぺらな素人判断を毛嫌いし，予め確実で深い知識を身につけることなしに理論物理学に分け入るのは不適切であり，科学の基礎を漏れなく学ぶことなく，独り立ちした科学研究はありえない」，と考えていた．これは，「理論物理学は単一の方法を有する統一的で不可分の科学である」という彼の信念を教育の場面に適用したものであり，「彼は自分の指導を受けたい者には，まずもって理論物理学のすべての分野の基礎を習得することを要求した．これらの基礎は『理論ミニマム』の七つの連続した部門（力学，場の理論，量子力学，統計物理学，連続媒体の力学，巨視的電気力学，相対論的量子力学）に含まれている」，ということである．

実際，文献1に収録された多くの若者からの学習に関する質問の手紙とそれらへのランダウの懇切な回答は，「彼（＝ランダウ）は，学問にかかわることでは絶対に妥協しなかったけれども，人々には好意をもって接し，科学に志す者を快く支援し，他人の才能や他人の研究を心底喜ぶことができたのである．ランダウの書簡の中では，若い人たちからの何をどのように学べばよいのかついての問い合わせに対する返事が多くを占めている」というリフシッツの言葉を裏書きする．このよう

に,『理論ミニマム』を受験して合格した若者は,それまでの経歴に依らずランダウの「学生・弟子」として扱われ,これは数学者ゲリファントが後年実行した教育の方法にも通じる極めて open で斬新な考え方と見るべきだろう.

ただし,「学問にかかわることでは絶対に妥協しなかった」という部分について言えば,次のようなリフシッツの評言が気になる:「単純さと秩序の追求はランダウの思考の本質的部分であった.それは真面目な問題においてだけではなく,ややくだけた事柄や彼特有のユーモアのセンスにおいても見受けられた.そんなわけで彼は,美しさにのっとった女性の分類から科学への貢献の度合いにのっとった理論物理学者の分類にいたるまで,すべてのものをランクづけしたがった」(文献1: p.89).無粋なコメントで誠に恐縮だが,分類するのは勝手だとして,それがどうして「ランク付け」に直結するのか,私には理解できない.ここでもし個人的邪推が許されるなら,ひょっとしてこれは,「統一的な方法に貫かれた単一の科学としての理論物理学の完全性というランダウの信念」がどこかで,「現象論」を一段低いものと見る通説的価値観や天才による発見に始まる演繹中心の古い科学観への通路を開いてしまっていたという恐れはないのだろうか?

「何故お前はそんな無粋な横道の議論をするのか?」—ランダウ・ファンのお叱りの顔が眼前にちらつきはじめたので,そろそろ筆をおくことにしたい.文献1には,ランダウと密接な交流を持った人達が彼の物理学,人生観等々について語った随想と共に,ランダウの反スターリン活動の計画とそれによる丸1年間の入獄に関わるソ連秘密警察(KGB)の資料が収録されていて,「公式の」伝記からは知り得ないランダウの人生観,哲学,政治思想を垣間見ることができる.その資料によれば,1938年から1939年に掛けて丸1年間,ランダウが姿を消したのは,スターリン専制に反対するビラの文案を作成しその配布を計画したことが事前に露見し,1938年4月に逮捕・投獄されたためだという.この間,ボーアとカピッツァがスターリンへ助命嘆願の手紙を書き,それが効を奏して,ランダウは1939年4月に釈放される.しかし,KGB資料が証言するように,釈放後のランダウは常時,継続的系統的監視下に置かれ,仲間内での発言も全て密告される「学識ある奴隷」(ランダウ)となって,戦後は水爆開発計画に従事することまで強いられている.

こうした「収容所列島」をもたらしたスターリン体制の恐怖も,またそれへの対抗思想も全て含め,20世紀の社会・政治・科学・技術・思想・文化を色濃く染め上げる基調は,“パワーポリティクス”に代表される強固な一元論的思考ではなかっただろうか? ランダウを救ったボーア・カピッツァの嘆願もスターリンのパワーポリティクス的計算なしには恐らく奏効しなかったに違いないし,そのスターリンに命懸けで抗したランダウの信念もまた,「統一的な方法に貫かれた単一の科学としての理論物理学の完全性」という別種の一元論だった.**20世紀的科学・技術**が遺した原発からの放射線汚染におびえる現代のわれわれは,この歴史と現状から出発し,未来へ向けてそこから何を学ぶべきだろうか?

末尾になり誠に恐縮ですが,佐々木力・山本義隆・桑野隆3氏による編集・翻訳のご努力が産み出した貴重な文献1の助けなしに,本稿を執筆することは全く不可能なことでした.ここに心からのお礼を申し上げます.

参考文献

1) 佐々木力・山本義隆・桑野隆編訳:『物理学者ランダウ』(みすず書房,2004).
2) アンナ・リワノワ著,松川秀郎訳:『ランダウの素顔—現代物理学の万能選手』(東京図書,1979).
3) I. Ojima and K. Okamura, Large Deviation Strategy for Inverse Problem, arXiv:1101.3690 (2011).
4) 例えば,田崎晴明:『熱力学—現代的な視点から』(培風館,2000);清水 明:『熱力学の基礎』(東京大学出版会,2007).
5) 小嶋 泉:エントロピー生成と van Hove limit ('87年「進化の力学への場の理論的アプローチ」研究会報告),素粒子論研究 **78** (1988), B14-B41; 物性研究 **51** (1988) [同時掲載].
6) I. Ojima, A unified scheme for generalized sectors based on selection criteria, Open Systems

and Information Dynamics, **10** (2003), 235–279 (math-ph/0303009); I. Ojima, Micro-macro duality in quantum physics, pp.143–161 in "Stochastic Analysis: Classical and Quantum–Perspectives of White Noise Theory" ed. by T. Hida, World Scientific (2005) (math-ph/0502038); 小嶋 泉・谷村省吾，双対性をめぐる物理学対話—量子と古典，ミクロとマクロ，「別冊数理科学」2007 年 4 月号，特集「双対性とは何か—諸分野に広がるデュアリティ・パラダイム」，pp.34–44; 小嶋　泉，代数的量子論とミクロ・マクロ双対性，「数理科学」2007 年 7 月号 (No.457), pp.18–23; 小嶋　泉，ミクロ・マクロ双対性，国際高等研究所報告集 No.0801 「量子情報の数理」第 9 章 (2008).

（おじま・いずみ，京都大学数理解析研究所）

情報幾何の新展開
脳と情報の数理科学
第8回

統計的推論はなぜ情報幾何なの？

甘利 俊一

ダイバージェンスに深入りして，皆さん食傷しているかもしれない．ここらで本題に入り，統計学の仕組みを眺めるとしよう．情報幾何は統計的推論を基礎づける数学的な枠組みとして発展してきた．確率分布の集まりを考え，現実に観測されるデータはこの中のどれか一つから出たものと考える．このとき，データがどの分布から出たかを考察するのが統計的推論である．不変な幾何構造を用いて，推論の仕組みを明らかにするのが情報幾何である*1)．

今回は，統計的推論を取り上げ，情報幾何の立場から議論しよう．思い返せば，これが情報幾何の出発点であった．まず，統計的推論の枠組みを幾何の立場から直観的に示す．しっかりした議論には微分幾何が必要だが，これはあとまわしにしよう．次回からは微分幾何入門に取りかかり，幾何学構造，特にリーマン計量，アファイン接続，共変微分，双対性など，微分幾何を初心者が楽しめるように導入する．

8.1 統計推論の幾何学的な枠組み—例題を用いた直観的説明

ここで統計的推論，特に分布のパラメータの推定と検定について，幾何学的な枠組みを述べよう．確率変数 x の分布がベクトルパラメータ $\boldsymbol{\xi}$ に依存して，$p(x,\boldsymbol{\xi})$ と書けたとしよう．このような分布の全体

$$M=\{p(x,\boldsymbol{\xi})\} \tag{8.1}$$

*1) 統計学の幾何学的な枠組みを考えたのは，長老 C.R. Rao である．今から 60 年以上昔のことであり，Rao は昨年 90 歳の誕生日を迎え，記念シンポジュームがインドで開かれた．私はその組織委員として名を連ねた．まだまだ元気で活躍している．その後，何人かの学者がこれを発展させた．なかでもロシアの N. Chentsov は西欧学会とは孤立していたが，不変性をもとに新しい接続に関する考えを導入した．（Kolmogorov の弟子であった Chentsov は 20 年ほど前に故人となった．残念なことである．）これとは別の流れで，アメリカの B. Efron の活躍があり，それに刺激されて私と公文雅之が統計の研究を開始し，長岡浩司の協力を得て双対微分幾何の導入にいたる．

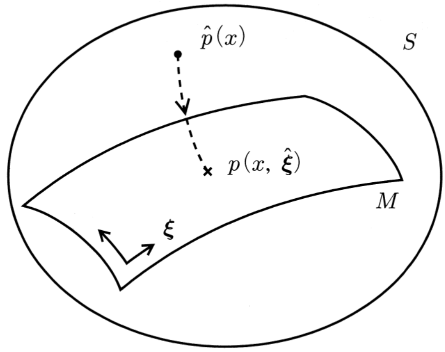


図 8.1　推定とは射影である．

を統計モデルという．x は離散でもベクトルでも良いし，時系列のような無限次元の変量でもよい．統計モデル M は $\boldsymbol{\xi}$ を（局所）座標系とする多様体をなすとする．簡単な例は，$\boldsymbol{\xi} = (\mu, \sigma)$ として，平均 μ と分散 σ^2 をパラメータとする 1 次元ガウス分布

$$p(x, \boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{8.2}$$

の全体である．

一つの分布 $p(x, \boldsymbol{\xi}_0)$（$\boldsymbol{\xi}_0$ は未知だが決まっている，これを真のパラメータという）から独立に発生した N 個のデータ $x_1, \cdots, x_N$ があるとする．推定とはデータをもとに，パラメータの値 $\boldsymbol{\xi}$ を決めることである．推定量 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ は，$x_1, \cdots, x_N$ の関数

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\xi}\,(x_1, \cdots, x_N) \tag{8.3}$$

になる．

ここで，ありとあらゆる確率分布を含む大きな空間

$$S = \{p(x)\} \tag{8.4}$$

を考えよう．そうすると，我々の統計モデル M は，S の部分空間になっているだろう（図 8.1）．いま仮に，N 個のデータが決める素直な確率分布 $\hat{p}(x)$ が，S の中にはすぐ見つかるとしよう．例えば，これは経験分布，

$$\hat{p}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \delta\,(x - x_i) \tag{8.5}$$

だとしよう．ヒストグラムを考えてもよい．(8.5) はデルタ関数を用いているから微分可能でなく，どんな関数空間 S を考えたらよいか怪しいが，とりあえずそれは無視して話を進めよう．データが定める S の分布 $\hat{p}(x)$ を観測分布または観測点という *2)．

*2)　x が離散の値をとる離散分布の場合は，$\hat{p}(x)$ として累積度数分布（ヒストグラム）を使えばよい．M が指数型分布族 S に含まれる場合には，データから最尤推定によって S の一点 $\hat{p}(x)$ が決まる．一般の連続分布 M の場合でこれが指数型分布族に含まれないときには，M に指数型のファイバーバンドルを付けて，議論を進めることになるが，これは高度な話題である．

推定とは，観測点 $\hat{p}$ が S の中に与えられた場合，これを M に写像して，M の点 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$，すなわち確率分布 $p(x,\hat{\boldsymbol{\xi}})$ を求めることである（図 8.1）．この写像を

$$f : S \to M, \quad \hat{\boldsymbol{\xi}} = f(\hat{p}) \tag{8.6}$$

とする．写像の仕方（関数 f）によって，いろいろな推定量が現れる．どれが良いのか，その特性を幾何学により明らかにしたい．いま，ある推定方式 f を考え，f により M の一点 $\boldsymbol{\xi}$ に写像されるような観測点の全体を $A(\boldsymbol{\xi})$ としよう．

$$A(\boldsymbol{\xi}) = \{\hat{p}(\boldsymbol{x})\,|\,f(\hat{p}) = \boldsymbol{\xi}\}, \tag{8.7}$$

すなわち，$A(\boldsymbol{\xi})$ は f の原像で，$\hat{p}$ が $A(\boldsymbol{\xi})$ に入れば推定量はこの $\boldsymbol{\xi}$ である．これを，推定に伴う補助多様体と呼ぶ．M が m 次元，S が n 次元ならば，$A(\boldsymbol{\xi})$ は $n-m$ 次元の空間である．一般には，これは補次元 $n-m$ の空間であり，$A(\boldsymbol{\xi})$ は $\boldsymbol{\xi}$ を動かせば全体として S を覆うことになる．つまり

$$\bigcup A(\boldsymbol{\xi}) = S \tag{8.8}$$

であって，$A(\boldsymbol{\xi})$ の全体で S を分割する（図 8.2）．

推定方式 (8.6) を定めれば補助多様体の集まり

$$\mathcal{A} = \{A(\boldsymbol{\xi})\} \tag{8.9}$$

が定まるし，逆に $\mathcal{A}$ を定めれば推定方式が定まる．補助多様体は，データ数 N に依存して定めてもよいので，必要ならばこれを $A_N(\boldsymbol{\xi})$ のように書く．補助多様体は実際，観測数 N に依存することが多い．例えば，最尤推定量による補助多様体は N に依存している．推定の方式の中で，補助多様体 $A(\boldsymbol{\xi})$ が，M 上の点 $\boldsymbol{\xi}$ 点（つまり分布 $p(x,\boldsymbol{\xi})$）を含む場合は，観測点 $\hat{p}$ がたまたま $p(x,\boldsymbol{\xi})$ であった場合に，推定量は $\hat{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\xi}$ となって，大変自然である．

推定には多数の観測データを用いる．N が大きいときは，観測点 $\hat{p}(x)$ は真の分布のすぐ近くにあると考えてよいだろう．つまり，N が無限大になるにつれて，観測点は真の分布に収束する．だから，N が無限大になるとき $A_N(\boldsymbol{\xi})$

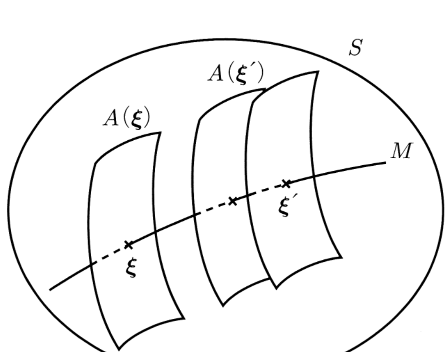


図 8.2　推定補助多様体 $A(\boldsymbol{\xi})$ の集まり，M が 1 次元の場合．

が M の点 $p(x,\boldsymbol{\xi})$ を含むならば，推定量は N が無限大になるにつれて真の値に近づく．このような推定量を一致性推定量という．一致性の幾何学的な表現は

$$\lim_{N\to\infty} A_N(\boldsymbol{\xi}) \ni p(x,\boldsymbol{\xi}) \tag{8.10}$$

である．

さて，観測点 $\hat{p}$ が M の近くにあるとき，推定量 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ は，$\hat{p}$ から M への正射影が良さそうである．ただ，空間 S はユークリッド空間ではないので，直交を定義するにはリーマン計量を用いる必要がある．ここからも幾何学が重要であることが分かる．$A(\boldsymbol{\xi})$ は，これが M と交わる $\boldsymbol{\xi}$ 点で M と直交しているのが良い．つまり両者の接空間が，リーマン計量を用いて直交していることである．観測点 $\hat{p}$ が M から離れてしまうと，直線で射影するというわけにもいくまい．$\hat{p}$ と推定量 $p(x,\hat{\boldsymbol{\xi}})$ を結ぶ線，つまり $A(\hat{\boldsymbol{\xi}})$ に沿った線は，どんな線が良いであろう．直観では真っすぐな線が良い（図 8.3）．すなわち，よい推定量を与える $A(\boldsymbol{\xi})$ は，M の $\boldsymbol{\xi}$ 点を通り，M に直交し，しかも真っすぐなものが良い．でも‘真っすぐ’とはどんな線だろう．S はユークリッド空間ではないから，これをしっかりと定義する必要がある．真っすぐな線とは測地線で，これを定義するには幾何学でいう接続がいる．ここからも，多様体 S と M との幾何構造が重要であることが分かる．

検定の幾何学についても触れておこう．検定では，真の分布は集合 $H_0=\{\boldsymbol{\xi}_0\}$ に属するとして，これを帰無仮説と呼び，その確からしさを問う．対立仮説として分布は $H_1=\{\boldsymbol{\xi}_1\}$ に属するという説を考え，仮説 H_0 を採用するのは間違いでこれは棄却されるべきか，それとも誤りとまではいいきれないとするかを決定する．H_1 は集合でよく，例えば $H_1=\{\boldsymbol{\xi}|\boldsymbol{\xi}\neq\boldsymbol{\xi}_0,\boldsymbol{\xi}\in M\}$ などが用いられる．2 つの仮説に対応して，S 上に領域 R とその補集合 $\bar{R}$ を設ける．観測点 $\hat{p}$ が $\bar{R}$ の中にあれば仮説を容認し，R にあれば棄却することになる（図 8.4）．幾何学としては，R をどう定めれば良いかが問題である．この領域の形状，とくにその境界が M と直交しているかどうか，またその曲率が検定の性能に関

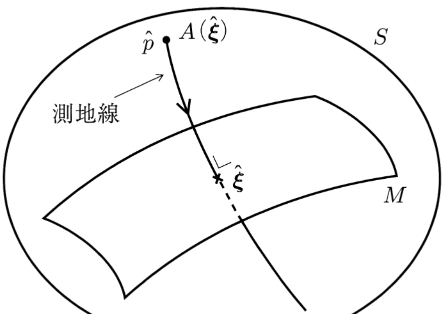


図 8.3　良い推定方式：$A(\boldsymbol{\xi})$ を直交する測地線にとる．

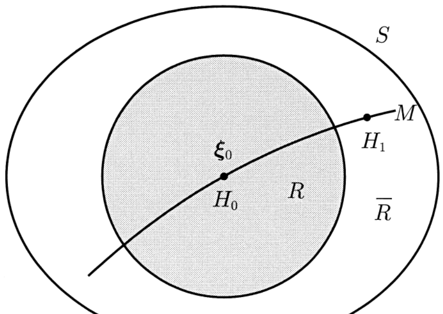


図 8.4　検定 H_0: $\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{\xi}_0$, H_1: $\boldsymbol{\xi}\neq\boldsymbol{\xi}_1$. R_0 は $\boldsymbol{\xi}_0$ を囲む領域になる．

係する．問題はまさに幾何学なのである．

従来，N が十分大きいとする漸近理論が幅を利かせてきた．これは確立された標準理論であり，大変有用である．幾何学の立場から見れば，N が十分大きいときは $\hat{p}$ と真の $p(x, \boldsymbol{\xi})$ とが近い．だから，M や $A(\boldsymbol{\xi})$ を線形近似して，線形幾何学で済ませることができる．すなわち，真の点 $p(x, \boldsymbol{\xi})$ のまわりの接空間の議論で済ませることである．こうしてきれいな統一的な理論ができる．

8.2 曲指数分布族における推論

前節の直観的な説明では満足できないという読者もいるかもしれない．ここで，少し具体的な議論をしておこう．全空間 $S = \{p(x)\}$ のモデルとして，指数型分布族

$$S = \{p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) \mid p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \exp\{\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{x} - \psi(\boldsymbol{\theta})\}\} \tag{8.11}$$

を考える．x が離散の場合は，いつもこの形に書ける．空間 S に含まれる部分モデル（部分空間）として，新しい m 次元パラメータ $\boldsymbol{u} = (u_1, \cdots, u_m)$ で指定されるモデル

$$M = \{p(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{u}))\} \tag{8.12}$$

を考えよう．ここでは，次元の低いパラメータ $\boldsymbol{u}$ を用いて，指数分布族の点 $\boldsymbol{\theta}$ が

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{u}) \tag{8.13}$$

で決まる．すなわち，M は S の（曲がった）部分空間になっている．このような統計モデルを曲指数型分布族と呼ぶ．すべての離散分布モデルは，指数型分布族かもしくは曲指数型分布族である．

曲指数型分布族の一例を挙げよう．入力信号 a が入ったとき，これを u 倍に拡大して ua とする装置があったとする（図 8.5）．ただし，a が入っても，入力 a にガウス雑音 ε（平均 0，分散 1 のガウス分布 $N(0,1)$ に従う）が加わり，出力は

$$x = u(a + \varepsilon) \tag{8.14}$$

になったとしよう．ここで $a = 1$ を入力して，観測される出力から u を推定したい．x の確率分布は平均 u，分散 u^2 のガウス分布に従う．すなわち，統計モデルは u をパラメータとして，

$$M : p(x, u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}u} \exp\left\{-\frac{(x-u)^2}{2u^2}\right\} \tag{8.15}$$

である．これは指数型分布族の形には書けないが，ガウス分布

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right\} \tag{8.16}$$

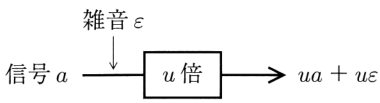


図 8.5　曲指数分布族の例 $N(u, u^2)$.

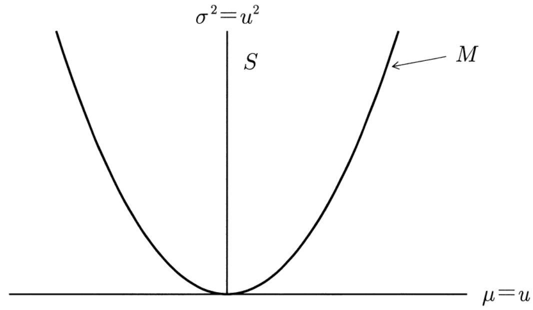


図 8.6　比例係数をパラメータとする曲指数分布族.

の一部であり，ガウス分布は書きなおせば

$$S : p(x, \boldsymbol{\theta}) = \exp\left\{\theta_1 x + \theta_2 x^2 - \psi(\boldsymbol{\theta})\right\}, \tag{8.17}$$

$$\theta_1 = -\frac{\mu}{\sigma^2}, \quad \theta_2 = -\frac{1}{2\sigma^2}, \tag{8.18}$$

$$\psi(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{(\theta_1)^2}{4\theta_2} + \frac{1}{2}\log\left(-\frac{\pi}{\theta_2}\right), \tag{8.19}$$

$$\boldsymbol{x} = \left(x, x^2\right) \tag{8.20}$$

の形の 2 次元の指数型分布族である．ここで

$$\theta_1 = \frac{1}{u}, \quad \theta_2 = -\frac{1}{2u^2} \tag{8.21}$$

とおけば $\boldsymbol{\theta}(u)$ が定まり，曲指数型分布族であることがわかる．M は S の中で

$$\theta_2 = -\frac{1}{2}(\theta_1)^2 \tag{8.22}$$

というパラボラ（放物線）になる．見やすい μ と σ^2 をパラメータとして書けば，M は

$$\mu = u, \quad \sigma^2 = u^2 \tag{8.23}$$

の形で 1 次元部分空間である（図 8.6）．

指数型分布族 S の座標系として $\boldsymbol{\theta}$ と，凸関数 $\psi(\boldsymbol{\theta})$ による Legendre 変換

$$\boldsymbol{\eta} = \nabla\psi(\boldsymbol{\theta}) = E[\boldsymbol{x}] \tag{8.24}$$

がある．$\boldsymbol{\eta}$ は $\boldsymbol{x}$ の期待値に等しいから，わかりやすい座標である．データ $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ が与えられたときに，その算術平均

$$\bar{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{N}\sum \boldsymbol{x}_i \tag{8.25}$$

は N が大きければ，大数の法則によって真のパラメータの値 $\boldsymbol{\eta}$ に収束する．だから，データの示す S の点（観測点）$\hat{p}(\boldsymbol{x})$ は，$\boldsymbol{\eta}$ 座標を用いて $\hat{\boldsymbol{\eta}} = \bar{\boldsymbol{x}}$ を満たす点 $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ を取ればよい（平均 μ が $\bar{x}_1$，2 乗平均 $\mu^2 + \sigma^2$ が $\bar{x}_2$ で指定される

ガウス分布）.

実は $\bar{\boldsymbol{x}}$ は十分統計量であって，データ $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ を縮約して算術平均 (8.25) を用いても，S では Fisher 情報量の損失はないことが分かっている．しかも，分布を S に属するとみて（M ではなくて良い），推定量として $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ を考えれば，これは S では Cramer–Rao の不等式を等号で達成する最良のものである．

$$E\left[\left(\hat{\eta}_i - \eta_i\right)\left(\hat{\eta}_j - \eta_j\right)\right] = \frac{1}{N} g_{ij}(\boldsymbol{\eta}). \tag{8.26}$$

8.3 曲指数分布族における推論の実際

ここまで来たから，前節の例題で統計的推論の実際を計算してみよう．わかりやすいうまい例題を用いれば事の本質がよくわかる．一般論は後でしっかりとやればよい．

図 8.6 に戻ろう．ここでは一つのデータ x は $\boldsymbol{\eta}$ 座標では $\boldsymbol{x} = \left(x, x^2\right)$ というベクトルで表せる．データ $x_1, \cdots, x_N$ が観測されたとき，データは $\boldsymbol{\eta}$ 座標で書くと

$$\hat{\boldsymbol{\eta}} = \frac{1}{N}\sum \boldsymbol{x}_i \tag{8.27}$$

となる S の分布 $\hat{p}$ を定める．

$$\hat{\eta}_1 = \frac{1}{N}\sum x_i, \quad \hat{\eta}_2 = \frac{1}{N}\sum x_i^2 \tag{8.28}$$

であるが，直観的な議論をするために，座標として $\left(\mu, \sigma^2\right)$ を用いる．すると観測点は $\left(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2\right)$ である．これを M に写像するのが推定である．まず，観測点を縦軸に沿って M に射影してみよう．これは，推定補助多様体として，縦軸に垂直な線を用いる（図 8.7）．こうすれば，推定量として

$$\hat{u} = \hat{\mu} \tag{8.29}$$

が得られる．これは一致推定量を与える．なぜならば，$A(u)$ が，点 u を通るからである（図 8.7）．でも，この推定量は分散 $\hat{\sigma}^2 = \hat{\eta}_2 - \hat{\eta}_1^2$ の情報を全く無視しているから，あまり良くないだろう．事実，$A(u)$ と M とは直交していない．

最尤推定量を考えてみよう．これは推定量として，データの尤度（つまり確率）を最大にする u を求めるものである．

$$\hat{u} = \arg\max \prod p\left(x_i, u\right). \tag{8.30}$$

実はこれは $\hat{p}(x)$ から $p(x, u)$ への KL ダイバージェンスを最小にする u,

$$\hat{u} = \arg\min KL\left[\hat{p}(x) : p(x, u)\right] \tag{8.31}$$

であることがわかっている．すると，これは前のダイバージェンスの議論から明らかなように，観測点 $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ を M に m 射影するものである．このとき，$A(u)$ は m 測地線で，しかも $A(u)$ と M とは直交する．もっと直接的に (8.30) の

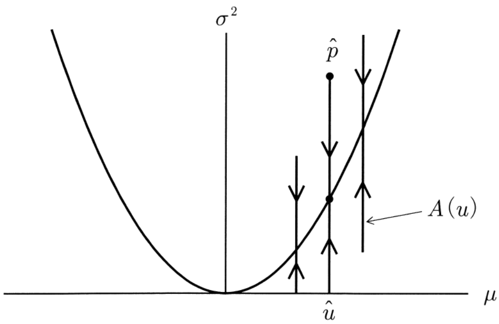


図 8.7　単純な推定 $\hat{u}=\bar{x}$ の補助多様体.

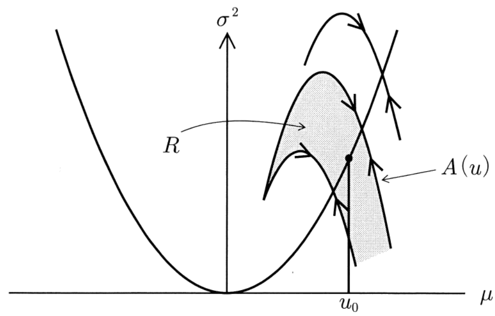


図 8.8　最尤推定の補助多様体と Wald 検定の受容域 R.

尤度最大化の方程式を解けば，最尤推定量 $\hat{u}$ は 2 次方程式

$$u^2+\hat{\mu}u=\hat{\mu}^2+\hat{\sigma}^2 \tag{8.32}$$

の解である．これを各 u に対する $(\hat{\mu},\hat{\sigma}^2)$ の満たすべき方程式と見れば，パラボラとなり，$A(u)$ は図 8.8 のように書ける．

詳しい議論は後に譲るが，これは N が大きいときの漸近理論で最も良い推定量，さらに高次の影響を考えても良いことが証明できる．ここでは先走って答だけを書く．推定量 $\hat{u}$ の平均 2 乗誤差を

$$E\left[(\hat{u}-u)^2\right]=\frac{1}{N}g^{-1}+\frac{1}{N^2}E+0\left(\frac{1}{N^3}\right) \tag{8.33}$$

のように，$1/N$ の巾で展開しよう．第 1 項を最小にするには，$A(u)$ が M と直交するようにすればよい．このとき，g が Fisher 情報量になる．もう少し精密な議論をして $1/N^2$ の係数 E を計算すると，これは $A(u)$ の曲率や M の曲率などで表せる．最尤推定量は $A(u)$ の曲率を 0 にするもので，$1/N^2$ の項まで見ても最も良い推定量である．幾何学の成果である．

この他にも，いろいろな推定量が考えられる．それらはみな，補助推定多様体 $A(u)$ をどう定めるかで決まる．良いものも悪いものもある．例えば，モーメント法なども考えられる．これが定める $A(u)$ を幾何学で調べれば，一般には直交性がなく，あまり良くない．

検定も議論しておこう．いま，$u=u_0$ が想定されているとして，これが本当かどうかを検定したい．帰無仮説として

$$H_0: u=u_0. \tag{8.34}$$

これに対する対立仮説として

$$H_1: u\neq u_0 \tag{8.35}$$

を考える．検定にはいろいろな方式があり，どれが良いか議論を呼んでいる．例えば，Wald 検定を考えよう．これは，最尤推定量 $\hat{u}$ を用いて，その値が u_0 に近ければ仮説を取り，遠いときは棄却する．すなわち，

$$c_1 \leq \hat{u} \leq c_2 \quad (c_1 < u_0 < c_2) \tag{8.36}$$

を受容域とする．$\hat{u}$ は最尤推定量であるから，最尤推定の補助多様体 $\mathcal{A}\{A(u)\}$ を用いて，$A(c_1)$ と $A(c_2)$ の間の領域が受容域になり，$\hat{\boldsymbol{\eta}}$ がここに入るときだけ H_0 が棄却されない．受容域の境界を決める定数 c_1, c_2 は，$u = u_0$ が真であったときにこの仮説が棄却される第一種過誤の確率，すなわち信頼水準 α（H_0 が真なのにこれを棄却する確率）と左右のバランス（不偏性）とによって決まる．Wald 検定の領域を描いてみると，これは図 8.8 のようになる．棄却領域 R は N に依存し，N が大きければ，受容域は狭まる．しかも，R の境界は漸近的に（N が大きくなるにつれて）M に直交するのでもっともらしい．漸近的に直交する受容域を持つ検定を漸近一様最強力検定という．

しかし，他にも漸近一様最強力検定はある．例えば，尤度比検定で，これは棄却領域を

$$\lambda(\bar{\boldsymbol{x}}) = -2 \log \frac{p(\bar{\boldsymbol{x}}, u_0)}{p(\bar{\boldsymbol{x}}, \hat{u})} \tag{8.37}$$

の値で定める．$\hat{u}$ は最尤推定量，$p(\bar{\boldsymbol{x}}, u)$ は真の値が u のときの $\bar{\boldsymbol{x}}$ の確率である．この 2 つの検定はどちらも漸近一様最強力であるが少し違う．両者の違いは，検出力曲線 $P(u)$，すなわち真の値が u であるときに H_0 を棄却する確率で示せる．$u \neq u_0$ ならこれが大きいほど良い．$1/N$ のオーダーで眺めると，どちらも同じである．$1/N^2$ のオーダーの項を計算するには曲率などの幾何学的な量が関係する．ここでも微分幾何が有用である．結論だけを述べると，尤度比検定は u の広い範囲で良好で，Wald 検定は u が u_0 より遠くはずれたところで良くなる．

終わりの一言

今回は統計的な推論を情報幾何はどう扱うのか，直観的な説明を開始した[1,2]．推論は幾何学として理解できる．しかし，これを詰めていくと，リーマン計量，接続，曲率などの諸概念が本質的に重要であることが分かる．情報幾何はこうして確率分布族の研究から始まった．しかし，それは確率分布族に限らない普遍的な構造を持つ．次回は，双対微分幾何入門としよう．厳密な数式的な取り扱いではなくて，諸概念を楽しく直観で理解できるようにしたい．

参考文献

1) S. Amari, *Differential Geometrical Methods in Statistics*, Lecture Notes in Statistics, 28, Springer, 1985.

2) R.E. Kess and P. Vos, *Geometrical Foundations of Asymptotic Inference*, Wiley, 1997.

（あまり・しゅんいち，理化学研究所脳科学総合研究センター）

特　集（2011 年 9 月号予告）

オイラー

18 世紀最大の数学者に迫る

本体 952 円

巻頭言	木村　達雄
オイラー入門	黒川　信重
オイラーとゼータ関数のルーツ	佐藤　文広
オイラーの無限解析	高瀬　正仁
オイラーと複素関数論	野口潤次郎
オイラーと位相幾何，組合せ理論	佐藤　肇
オイラーとニュートンと古典力学	和田　純夫
オイラーと流体力学	高木　隆司
[コラム]	足立　恒雄
[コラム]	木村　達雄

特　集（2011 年 7 月号）

〈隠れた〉物理法則

自然界の真相を探る

本体 952 円

巻頭言	白水　徹也
物理学の対称性の様々な側面	藤川　和男
隠れた定数　暗黒エネルギー	辻川　信二
隠された粒子と物質　素粒子物理と暗黒物質	川崎　雅裕
隠れた次元　ブレーン・超弦理論	橋本　幸士
隠れていた場　ゴースト場の凝縮機構	向山　信治
隠れた変数　ベルの不等式など	井元　信之
隠れた秩序　スピングラスに潜む秩序	川村　光
隠れた位相　ホール効果と幾何学的位相	村上　修一
[コラム]〈隠れた〉物理繁盛？	佐藤　文隆
[編集部一問一答]〈隠れた〉物理の面白さ	白水　徹也
《連載》 情報幾何の新展開　その 7	甘利　俊一
《人物で学ぶ数学》 第 5 回	後藤　四郎
《現象から方程式を創り出す》 第 18 回	佐藤　文隆

編集後記

今回の特集はいかがでしたでしょうか．

計算をコンピュータで行うことは，私たちが机の上で紙と鉛筆を使って計算するよりも速く正確にたくさんの計算を処理できることは明らかです．各記事では，「たくさんの計算ができる」ということを使いたいという発想・動機が潜んでいることも注目したいところです．こうしたことは，実生活でも例えばたくさんの物事を処理したいときに必要になってくるのではないでしょうか．

しかしながら，忘れてはならないのはこうした計算をするという根本に様々な理論の解明をしたいという動機があるということです．したがって，それら根底にある理論を知っていないと実際にコンピュータを用いた計算に取り組むのが難しいのではないかと思います．こうした事情は結果を読み解く際にも言えることで例えば，世の中にあふれているシミュレーションの結果にしても，なぜ，そのシミュレーションを行ったか，そこに存在する根底の問題は何なのか，といったことを読み解いていくことが今後は必要になってくるのかな，と思います．

計算が時代を拓いていくであろう未来に私たちの思考も計算をうまく読み解けるようついていきたいものです．　(R)

数　理　科　学　8月号

2011 年 8 月 1 日発行

数　理　科　学　編　集　部　　　発行人　木　下　敏　孝
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp　まで．

発行所　©　株式会社　サ　イ　エ　ン　ス　社　　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒 151–0051 東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁